СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

XXX КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

30th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Book of Abstracts

Београд - Belgrade
2026.

XXX КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

Издавач:
Српско кристалографско друштво,
Ђушина 7, 11000 Београд,
тел./факс: 3336-701

За издавача:
Тамара Тодоровић

Уредник:
Ивана Вељковић

Технички уредник:
Весна Медаковић

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

© Српско кристалографско друштво

ISBN 978-86-912959-8-1
ISSN 0354-5741

Штампа:
ЛАМПАС д.о.о.
Партизанске авијације 29
11077 Нови Београд

Тираж: 90

Београд
2026

30th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Book of Abstracts

Publisher:
Serbian Crystallographic Society,
Đušina 7, 11000 Belgrade, Serbia,
phone/fax: +381-11-3336-701

For the publisher:
Tamara Todorović

Editor:
Ivana Veljković

Technical editor:
Vesna Medaković

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

© Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-8-1
ISSN 0354-5741

Printing:
LAMPAS d.o.o.
Partizanske avijacije 29
11077 Novi Beograd

Copies: 90

Belgrade
2026

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

XXX КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

30th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Научни одбор / Рецензентски тим:

др Гидо Рајс, Хајнрих Хајне Универзитет, Дизелдорф, Немачка
др Ирина Коновалова, Национална академија наука Украјине, Харков, Украјина
др Јан Рохличек, Академија наука Републике Чешке, Праг, Чешка
др Том Леисенс, Католички универзитет у Левену, Левен, Белгија
др Александер Речник, Институт Јожеф Штефан, Љубљана, Словенија
др Весна Рибић, Институт Јожеф Штефан Љубљана, Словенија
др Миљан Биговић, ПМФ, Подгорица, Црна Гора
др Јасминка Поповић, Институт Руђер Бошковић, Загреб, Хрватска
др Александар Вишњевац, Институт Руђер Бошковић, Загреб, Хрватска
др Душан Вељковић, УБХФ, Београд, Србија
др Марко Родић, ПМФ, Нови Сад, Србија
др Ивана Вељковић, ИХТМ, Београд, Србија
др Тамара Тодоровић, УБХФ, Београд, Србија

Scientific Committee / Reviewer Board:

Dr Guido Reiss, Heinrich Heine Universität, Düsseldorf, Germany
Dr Irina Konovalova, National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkiv, Ukraine
Dr Jan Rohlíček, the Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic
Dr Tom Leyssens, UCLouvain, Louvain, Belgium
Dr Aleksander Rečnik, Jožef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia
Dr Vesna Ribić, Jožef Stefan Institute, Ljubljana Slovenia
Dr Miljan Bigović, PMF, Podgorica, Montenegro
Dr Jasminka Popović, Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Croatia
Dr Aleksandar Višnjevac, Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Croatia
Dr Dušan Veljković, UBHF, Belgrade, Serbia
Dr Marko Rodić, PMF, Novi Sad, Serbia
Dr Ivana Veljković, IHTM, Belgrade, Serbia
Dr Tamara Todorović, UBHF, Belgrade, Serbia

Организациони одбор:

др Душан Вељковић, УБХФ, Београд, Србија
др Ивана Вељковић, ИХТМ, Београд, Србија
др Весна Медаковић, УБХФ, Београд, Србија
др Александра Ђуновић, ИЦХФ, Београд, Србија
др Данијела Кретић, УБХФ, Београд, Србија

Organizing Committee:

Dr Dušan Veljković, UBHF, Belgrade, Serbia
Dr Ivana Veljković, IHTM, Belgrade, Serbia
Dr Vesna Medaković, UBHF, Belgrade, Serbia
Dr Aleksandra Đunović, ICHF, Belgrade, Serbia
Dr Danijela Kretić, UBHF, Belgrade, Serbia

ОРГАНИЗАТОР – ORGANIZER

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

СУОРГАНИЗАТОР – CO-ORGANIZER

UNIVERZITET U BEOGRADU – INSTITUT ZA HEMIJU, TEHNOLOGIJU I METALURGIJU – INSTITUT OD NACIONALNOG ZNAČAJA ZA REPUBLIKU SRBIJU

UNIVERSITY OF BELGRADE – INSTITUTE OF CHEMISTRY, TECHNOLOGY AND METALLURGY – NATIONAL INSTITUTE OF THE REPUBLIC OF SERBIA

ПАРТНЕРИ КОНФРЕНЦИЈЕ – CONFERENCE PARTNERS

Faculty of Chemistry
University of Belgrade

CCDC
advancing structural science

ИНОВАЦИОНИ ЦЕНТАР

INNOVATIVE CENTRE
FACULTY OF CHEMISTRY
BELGRADE LTD

СПОНЗОРИ – SPONSORS

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

MC LABOR
LABORATORIJSKA I PROCESNA OPREMA

KRUG
KRUG INTERNATIONAL LTD.

SUPERLAB®
Your Lab - Our Passion
Rigaku

symmetry

UNI-CHEM

САДРЖАЈ – CONTENTS

ПЛЕНАРНА ПРЕДАВАЊА – PLENARY LECTURES

Anna Hoser
BRIDGING EXPERIMENT AND THEORY: DYNAMIC QUANTUM CRYSTALLOGRAPHY FOR EXPLORING POLYMORPHISM 2

Ildikó Cora, Matteo Bosi, András Kovács, Zsolt Fogarassy, Roberto Fornari, Alexander Azarov, Andrej Kuznetsov, Béla Pécz
STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF PHASE TRANSFORMATIONS IN GALLIUM OXIDE BY TRANSMISSION ELECTRON MICROSCOPY 4

Guido J. Reiss
TOO SYMMETRIC TO BE TRUE: PSEUDOSYMMETRY IN CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION 5

Emil S. Bozin
ULTRAFAST PDF: REVEALING HIDDEN NON-EQUILIBRIUM STATES IN QUANTUM MATERIALS 6

Irina S. Konovalova
RETHINKING CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS: BEYOND GEOMETRY 7

ПРЕДАВАЊА ПО ПОЗИВУ – INVITED LECTURES

Љиљана Карановић
ЈУБИЛАРНА 30. КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА 10

Ljiljana Karanović
THE JUBILEE 30TH CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY 11

Весна Рибић, Вања Јордан, Сандра Древ, Јанез Ковач, Горан Дражић, Александер Речник
СТРУКТУРА МЕЂУПОВРШИНЕ ХОМОЕПИТАКСИЈАЛНИХ РУТИЛНИХ ВЛАКАНА 12

Vesna Ribić, Vanja Jordan, Sandra Drev, Janez Kovač, Goran Dražić, Aleksander Rečnik
INTERFACE STRUCTURE OF HOMOEPITAXIAL RUTILE FIBERS 13

УСМЕНА САОПШТЕЊА – ORAL PRESENTATIONS

Марко В. Родић, Милица Г. Богдановић, Видак Раичевић, Guido J. Reiss, Irina S. Konovalova
СЛИЧНОСТ СЛОЈЕВА У АНХИДРОВАНОМ И ХИДРАТИСАНОМ КРИСТАЛНОМ ОБЛИКУ ТИОСЕМИКАРБАЗОНА ХИНУКЛИДИНОНА: РЕЗУЛТАТИ АНАЛИЗЕ ПАКОВАЊА У КРИСТАЛУ И ЕНЕРГИЈА МЕЂУМОЛЕКУЛСКИХ ИНТЕРАКЦИЈА 16

Marko V. Rodić, Milica G. Bogdanović, Vidak Raičević, Guido J. Reiss, Irina S. Konovalova
LAYER SIMILARITY IN THE ANHYDROUS AND HYDRATED CRYSTAL FORMS OF QUINUCLIDINONE THIOSEMICARBAZONE: INSIGHTS FROM CRYSTAL PACKING AND INTERMOLECULAR INTERACTION ENERGY ANALYSIS 17

Никола Јакупец, Michael Bodensteiner, Крешимир Молчанов
ПРОТОНОВАНИ ПОЛИЦИЈАНОМЕТАЛАТИ КАО ПРОМОТЕРИ O···π ИНТЕРАКЦИЈА, ИСПИТИВАЊЕ МОДИФИКОВАНОГ 2,3-ДИХЛОРО-5,6-ДИЦИЈАНО-*p*-БЕНЗОХИНОНА И ЊЕГОВИХ НЕКОВАЛЕНТНИХ ИНТЕРАКЦИЈА 18

Nikola Jakupec, Michael Bodensteiner, Krešimir Molčanov
PROTONATED POLYCYANOMETALLATES AS FACILITATORS OF O··· π INTERACTIONS, AN EXAMINATION OF MODIFIED 2,3-DICHLORO-5,6-DICYANO-*p*-BENZOQUINONE AND ITS NONCOVALENT INTERACTIONS 19

Андреј Дедић, Горан Богдановић, Слађана Новаковић
БЕНЗЕН НА ГРАНИЦИ CH/π ИНТЕРАКЦИЈА: CSD И DFT СТУДИЈА 20

Andrej Dedić, Goran Bogdanović, Slađana Novaković
BENZENE AT THE LIMIT OF CH/π INTERACTIONS: CSD AND DFT STUDY 21

Dimitrije Mara, Frankline Keming Ndula, Zhiwang Cai, Flavia Artizzu, Thierry Verbiest, Rik Van Deun
ЗАВИСНОСТ ЛУМИНЕСЦЕНТНИХ СВОЈСТАВА ОД СТРУКТУРНИХ КАРАКТЕРИСТИКА LnMOF-ОВА 22

Dimitrije Mara, Frankline Keming Ndula, Zhiwang Cai, Flavia Artizzu, Thierry Verbiest, Rik Van Deun
RELATIONSHIP BETWEEN STRUCTURAL PROPERTIES ON LUMINESCENT PROPERTIES OF LnMOFs 23

Андреј Миливојац, Александар Вишњевац, Јасминка Поповић, Тамара Тодоровић
КРИСТАЛОХЕМИЈА КОБАЛТОВИХ ЗЕОЛИТНИХ ИМИДАЗОЛАТНИХ УМРЕЖЕНИХ СТРУКТРА СА 4,5-ДИСУПСТИТУИСАНИМ ИМИДАЗОЛСКИМ ЛИНКЕРИМА 24

Andrej Milivojac, Aleksandar Višnjevac, Jasminka Popović, Tamara Todorović
CRYSTAL CHEMISTRY OF COBALT ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORKS BASED ON 4,5-DISUBSTITUTED IMIDAZOLE LINKERS..... 25

Никола Д. Радновић, Марко В. Родић, Светлана К. Белошевић, Вукадин М. Леовац
КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ НОВИХ КОМПЛЕКСА Co(II) И Ni(II) СА СЕМИКАРБАЗОНОМ ПИРИДОКСАЛА 26

Nikola D. Radnović, Marko V. Rodić, Svetlana K. Belošević, Vukadin M. Leovac
CRYSTAL STRUCTURES OF NEW Co(II) AND Ni(II) COMPLEXES WITH PYRIDOXAL SEMICARBAZONE..... 27

Лидија Радовановић, Душан Маленов, Марко Родић, Јелена Роган
УТИЦАЈ ТОПОЛОГИЈЕ ПОЛИКАРБОКСИЛАТНИХ ЛИГАНАДА НА АРХИТЕКТУРУ Co(II)-КОМПЛЕКСА 28

Lidija Radovanović, Dušan Malenov, Marko Rodić, Jelena Rogan
INFLUENCE OF POLYCARBOXYLATE LIGAND TOPOLOGY ON THE ARCHITECTURE OF Co(II)-COMPLEXES 29

Божидар Николић
ЕЛЕКТРОН-ФОНОН ИНТЕРАКЦИЈА У КАГОМЕ РЕШЕТКИ: СИМЕТРИЈСКА АНАЛИЗА..... 30

Božidar Nikolić
ELECTRON-PHONON COUPLING IN KAGOME LATTICE: SYMMETRY-BASED ANALYSIS..... 31

Слађана Ђорђевић, Катарина А. Ћеранић, Филип Сташевић, Душан П. Маленов
ОСНАЖИВАЊЕ СТУДЕНАТА ХЕМИЈЕ У ОТКРИВАЊУ НЕКОВАЛЕНТНИХ ИНТЕРАКЦИЈА КОРИШЋЕЊЕМ КЕМБРИЧКЕ БАЗЕ СТРУКТУРНИХ ПОДАТАКА – CSD4NCI РАДИОНИЦА 32

Slađana Đorđević, Katarina A. Ćeranić, Filip Stašević, Dušan P. Malenov
EMPOWERING CHEMISTRY STUDENTS TO DISCOVER NONCOVALENT INTERACTIONS VIA THE CAMBRIDGE STRUCTURAL DATABASE – CSD4NCI WORKSHOP 33

Вук Радмиловић
КАКО СЕ ЗАВАРУЈУ СРЕБРНЕ НАНОЖИЦЕ: КОРЕЛАТИВНА 3Д ТОМОГРАФИЈА И 4Д-СТЕМ АНАЛИЗА СПОЈЕВА 34

Vuk Radmilović
HOW SILVER NANOWIRES WELD: A CORRELATIVE 3D TOMOGRAPHY AND 4D-STEM STUDY OF JUNCTION FORMATION..... 35

ПОСТЕРСКА САОПШТЕЊА – POSTER PRESENTATIONS

Јована Арашков, Александар Вишњевац, Татјана Срдић-Рајић, Тамара Тодоровић, Ненад Филиповић
МОНОНУКЛЕАРНИ КОМПЛЕКС Zn(II) СА ХИДРАЗОНИЛ-ТИАЗОЛОМ: ТРАНСФОРМАЦИЈА У 1Д КООРДИНАЦИОНИ ПОЛИМЕР, СТРУКТУРНА АНАЛИЗА И ЦИТОТОКСИЧНА АКТИВНОСТ 38

Jovana Araškov, Aleksandar Višnjevac, Tatjana Srdić-Rajić, Tamara Todorović, Nenad Filipović
MONONUCLEAR Zn(II) HYDRAZONYL-THIAZOLE COMPLEX: TRANSFORMATION INTO A 1D COORDINATION POLYMER, STRUCTURE ANALYSIS AND CYTOTOXICITY 39

Миљан Биговић, Душан Вељковић, Јелена Петровић, Ивана Вељковић
СЛАБЕ C–H···O ИНТЕРАКЦИЈЕ КОЈЕ УКЉУЧУЈУ ПЕРТЕХНЕЦИЈУМСКУ КИСЕЛИНУ: УВИДИ ИЗ КРИСТАЛНИХ СТРУКТУРА И КВАНТНОХЕМИЈСКИХ ПРОРАЧУНА 40

Miljan Bigović, Dušan Veljković, Jelena Petrović, Ivana Veljković
WEAK C–H···O INTERACTIONS INVOLVING PERTECHNETIC ACID: INSIGHTS FROM CRYSTAL STRUCTURES AND QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS 41

Милица Г. Богдановић, Милан С. Нешић, Matic Lozinšek, Нико С. Радуловић, Марко В. Родић
α-ИМИНОАМИДИНИ: УВИД У КРИСТАЛНО ПАКОВАЊЕ НА ОСНОВУ УТАЧЊАВАЊА МОДЕЛОМ ХИРШФЕЛДОВОГ АТОМА И ЕНЕРГИЈА МЕЂУМОЛЕКУЛСКИХ ИНТЕРАКЦИЈА 42

Milica G. Bogdanović, Milan S. Nešić, Matic Lozinšek, Niko S. Radulović, Marko V. Rodić
A STUDY OF α-IMINOAMIDINES: INSIGHTS INTO CRYSTAL PACKING BASED ON HIRSHFELD ATOM REFINEMENT AND INTERMOLECULAR INTERACTION ENERGIES 43

Андреј Миливојац, Александар Вишњевац, Јасминка Поповић, Тамара Тодоровић
МЕЂУСОБНИ УТИЦАЈ КООРДИНАЦИОНЕ ФЛЕКСИБИЛНОСТИ Cu(II) И КООРДИНАЦИЈЕ РАСТВАРАЧА У СЛОЈЕВИТОМ ZIF-У СА 4,5-ДИХЛОРОИМИДАЗОЛОМ 44

Andrej Milivojac, Aleksandar Višnjevac, Jasminka Popović, Tamara Todorović
INTERPLAY OF Cu(II) COORDINATION FLEXIBILITY AND SOLVENT COORDINATION IN A LAYERED ZIF WITH 4,5-DICHLOROIMIDAZE 45

Branislava Vučetić, Andrijana Žekić, Milica Milojević, Biljana Maksimović
FORMIRANJE KRISTALNIH STRUKTURA PRI ISPARAVANJU KAPLJICA *KDP* RASTVORA – UTICAJ PODLOGE 46

Branislava Vučetić, Andrijana Žekić, Milica Milojević, Biljana Maksimović
FORMATION OF CRYSTAL STRUCTURES IN EVAPORATING *KDP* SESSILE DROPLETS – SUBSTRATE EFFECTS 47

Александра Б. Ђуновић, Христина Господиновић, Душан Ж. Вељковић
УТИЦАЈ ПРИСУСТВА ДИХАЛОАМИНСКИХ СУПСТИТУЕНАТА НА ВИСОКОЕНЕРГЕТСКА СВОЈСТВА НИТРОАРОМАТИЧНИХ МОЛЕКУЛА 48

Aleksandra B. Đunović, Hristina Gospodinović, Dušan Ž. Veljković
INFLUENCE OF THE PRESENCE OF DIHALOAMINE SUBSTITUENTS ON THE HIGH-ENERGY PROPERTIES OF NITROAROMATIC MOLECULES 49

Goran V. Janjić, Petar Stanić, Katarina Miletić, Ivana Veljković, Marija Petković Benazzouz
GEOMETRIJSKA PRILAGODLJIVOST AROMATIČNIH F···O INTERAKCIJA 50

Goran V. Janjić, Petar Stanić, Katarina Miletić, Ivana Veljković, Marija Petković Benazzouz
GEOMETRICAL ADAPTABILITY OF AROMATIC F···O INTERACTIONS 51

Мима Јевтовић, Милица Савић, Марија Павловић, Матија Златар
СТРУКТУРНА И СПЕКТРОСКОПСКА КАРАКТЕРИЗАЦИЈА ТЕТРАНУКЕЛАРНОГ АЗИДО КОМПЛЕКСА Cd(II) СА СЕМИКАРБАЗОНСКИМ ЛИГАНДОМ 52

Mima Jevtović, Milica Savić, Marija Pavlović, Matija Zlatar
STRUCTURAL AND SPECTROSCOPIC CHARACTERIZATION OF A TETRANUCLEAR Cd(II) AZIDO COMPLEX WITH A SEMICARBAZONE LIGAND 53

Данијела Луковић Голић, Наташа Јовић Орсини, Александар Радојковић
КРИСТАЛНА СТРУКТУРА МУЛТИФЕРОИЧНЕ КЕРАМИКЕ $Bi_{0.9}RE_{0.1}FeO_3$ (RE=La, Nd, Gd, Tb, Ho) 54

Danijela Luković Golić, Nataša Jović Orsini, Aleksandar Radojković
THE CRYSTAL STRUCTURE OF MULTIFERROIC $Bi_{0.9}RE_{0.1}FeO_3$ (RE=La, Nd, Gd, Tb, Ho) CERAMICS 55

Марија Калуђеровић, Миљан Биговић, Ивана С. Вељковић, Душан Ж. Вељковић
ТЕОРИЈСКО ПРОУЧАВАЊЕ S···S И Se···Se ИНТЕРАКЦИЈА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА МЕТАЛНИХ СУЛФИДА И СЕЛЕНИДА 56

Marija Kaluđerović, Miljan Bigović, Ivana S. Veljković, Dušan Ž. Veljković
THEORETICAL STUDY OF S···S AND Se···Se INTERACTIONS IN CRYSTAL STRUCTURES OF METALLIC SULFIDES AND SELENIDES 57

Ана Кандић, Стефан Николић, Јелена Пољаревић, Antoine Dupé, Љиљана Михајловић
УПОРЕДНА СТРУКТУРНА АНАЛИЗА ОКСИДОРЕНИЈУМ(V) КОМПЛЕКСА СА АПИГЕНИНОМ И ЊЕГОВИМ БЕНЗИЛ ДЕРИВАТОМ 58

Ana Kandić, Stefan Nikolić, Jelena Poljarević, Antoine Dupé, Ljiljana Mihajlović
COMPARATIVE STRUCTURAL STUDY OF OXIDORHENIUM(V) COMPLEXES WITH APIGENIN AND BENZYL-APIGENIN 59

Сања Б. Коканов, Александар Вишњевац, Тамара Тодоровић, Ненад Филиповић
СИНТЕЗА И КРИСТАЛОГРАФСКА АНАЛИЗА КОМПЛЕКСА Cd(II) СА ЛИГАНДОМ КЛАСЕ ТИАЗОЛИЛ ХИДРАЗОНА 60

Sanja B. Kokanov, Aleksandar Višnjevac, Tamara Todorović, Nenad Filipović
SYNTHESIS AND CRYSTALLOGRAPHIC ANALYSIS OF Cd(II) COMPLEXES WITH A THIAZOLYL HYDRAZONE LIGAND 61

Данијела Кретић, Душан Ж. Вељковић
СТРУКТУРНИ ФАКТОРИ И ЊИХОВ УТИЦАЈ НА ЈАЧИНУ ВОДОНИЧНИХ ВЕЗА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА АЦЕТИЛСАЛИЦИЛНЕ КИСЕЛИНЕ 62

Danijela Kretić, Dušan Ž. Veljković
STRUCTURAL FACTORS AND THEIR INFLUENCE ON THE STRENGTH OF HYDROGEN BONDS IN THE CRYSTAL STRUCTURES OF ACETYLSALICYLIC ACID 63

Јелена Лађаревић, Лидија Радовановић, Бојан Божић, Александра Машуловић, Немања Тришовић, Јелена Роган, Душан Мијин
КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ ОДАБРАНИХ АЗО ПИРИДОНСКИХ БОЈА 64

Jelena Lađarević, Lidija Radovanović, Bojan Božić, Aleksandra Mašulović, Nemanja Trišović, Jelena Rogan, Dušan Mijin
CRYSTAL STRUCTURES OF SELECTED AZO PYRIDONE DYES 65

Анита Лазић, Лидија Радовановић, Јелена Роган, Olivier Jeannin, Franck Camerel, Sergi Burguera, Antonio Frontera, Немања Тришовић
ОДНОС МОЛЕКУЛСКЕ И СУПРАМОЛЕКУЛСКЕ СТРУКТУРЕ КОД ОДАБРАНИХ СПИРОХИДАНТОИНА 66

Anita Lazić, Lidija Radovanović, Jelena Rogan, Olivier Jeannin, Franck Camerel, Sergi Burguera, Antonio Frontera, Nemanja Trišović
RELATIONSHIP BETWEEN THE MOLECULAR AND SUPRAMOLECULAR STRUCTURE IN SELECTED SPIROHYDANTOINS 67

Миленко М. Буновић, Катарина А. Ћеранић, Душан П. Маленов
СТЕКИНГ ИНТЕРАКЦИЈЕ ИЛИ ВОДОНИЧНЕ ВЕЗЕ? КРИСТАЛОГРАФСКО И КВАНТНОХЕМИЈСКО ПРОУЧАВАЊЕ ДИМЕРА ТРИАЗИНА 68

Milenko M. Bunović, Katarina A. Ćeranić, Dušan P. Malenov
STACKING INTERACTIONS OR HYDROGEN BONDS? CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM CHEMICAL STUDY OF TRIAZINE DIMERS 69

Весна Б. Медаковић, Ивана С. Вељковић, Душан Ж. Вељковић
РАЗЛИКЕ У ГЕОМЕТРИЈАМА КРИСТАЛНИХ СТРУКТУРА УТИЧУ НА ВРЕДНОСТИ HOMO–LUMO ЕНЕРГЕТСКОГ РАЗМАКА НИТРОАРОМАТИЧНИХ ЕКСПЛОЗИВА 70

Vesna B. Medaković, Ivana S. Veljković, Dušan Ž. Veljković
DIFFERENCES IN CRYSTAL STRUCTURE GEOMETRIES AFFECT HOMO–LUMO GAP VALUES OF NITROAROMATIC MOLECULES 71

Мирјана Милић, Биљана Дојчиновић, Братислав Антић
ХИДРОСТАБИЛНОСТ РАЗЛИЧИТИХ ZIF-8 СТРУКТУРА ЗА УКЛАЊАЊЕ АРСЕНА ИЗ ПРИРОДНИХ ВОДА 72

Mirjana Milić, Biljana Dojčinović, Bratislav Antić
HYDROLYTIC STABILITY OF VARIOUS ZIF-8 STRUCTURES FOR ARSENIC REMOVAL FROM NATURAL WATERS 73

Наталија Милојковић, Бојана Симовић, Лидија Радовановић, Горан Бранковић, Јелена Гулицовски, Александра Дапчевић
СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА АДСОРБЕНТА α-Bi_2O_3 МОДИФИКОВАНОГ ХИТОЗАНОМ 74

Natalija Milojković, Bojana Simović, Lidija Radovanović, Goran Branković, Jelena Gulicovski, Aleksandra Dapčević
SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF CHITOSAN-MODIFIED α-Bi_2O_3 ADSORBENT 75

Јелена Митровић, Матејка Подлогар, Милица Почуча-Нешић, Оливера Земљак, Александар Малешевић, Александар Радојковић, Тина Радошевић, Мојца Отоничар, Зорица Бранковић, Горан Бранковић
СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА БАРИЈУМ-СТАНАТА ДОПИРАНОГ ИНДИЈУМОМ ДОБИЈЕНОГ ТЕХНИКОМ ХЛАДНОГ СИНТЕРОВАЊА 76

Jelena Mitrović, Matejka Podlogar, Milica Počuča-Nešić, Olivera Zemljak, Aleksandar Malešević, Aleksandar Radojković, Tina Radošević, Mojca Otoničar, Zorica Branković, Goran Branković
SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF THE INDIUM DOPED BARIUM STANNATE OBTAINED BY COLD SINTERING TECHNIQUE 77

Слађана Новаковић, Андреј Дедић, Иван Јуранић, Горан Богдановић
СТРУКТУРНЕ КАРАКТЕРИСТИКЕ И КАРАКТЕРИСТИКЕ ГУСТИНЕ НАЕЛЕКТРИСАЊА *α,β*-НЕЗАСИЋЕНЕ КЕТО КИСЕЛИНЕ 78

Slađana Novaković, Andrej Dedić, Ivan Juranić, Goran Bogdanović
STRUCTURAL AND CHARGE DENSITY FEATURES OF AN *α,β*-UNSATURATED CARBONYL ACID 79

Бојана В. Пантовић, Тина П. Андрејевић, Марта Почкај, Виолета Р. Марковић, Дарко П. Ашанин, Невена Љ. Стевановић, Биљана Ђ. Глишић
КРИСТАЛНА СТРУКТУРА СРЕБРО(I) КОМПЛЕКСА СА *N*-БЕНЗИЛТИАБЕНДАЗОЛОМ 80

Bojana V. Pantović, Tina P. Andrejević, Marta Počkaj, Violeta R. Marković, Darko P. Ašanin, Nevena Lj. Stevanović, Biljana Đ. Glišić
CRYSTAL STRUCTURE OF SILVER(I) COMPLEX WITH *N*-BENZYLTHIABENDAZOLE 81

Бојана В. Пантовић, Дарко П. Ашанин, Тина П. Андрејевић, Невена Љ. Стевановић, Ненад С. Драшковић, Милош И. Ђуран, Биљана Ђ. Глишић
КРИСТАЛНА СТРУКТУРА НИКЛ(II) КОМПЛЕКСА СА 2-ХИДРОКСИ-1,3-ПРОПАНДИАМИН-*N,N,N',N'*-ТЕТРААЦЕТАТОМ 82

Bojana V. Pantović, Darko P. Ašanin, Tina P. Andrejević, Nevena Lj. Stevanović, Nenad S. Drašković, Miloš I. Đuran, Biljana Đ. Glišić
CRYSTAL STRUCTURE OF A NICKEL(II) COMPLEX WITH 2-HYDROXY-1,3-PROPANEDIAMINE-*N,N,N',N'*-TETRAACETATE 83

Марија Павловић, Мима Јевтовић, Маја Шумар Ристовић, Божидар Чобељић
СИНТЕЗА И СТРУКТУРНА КАРАКТЕРИЗАЦИЈА ДИНУКЛЕАРНОГ АЗИДО-ПРЕМОШЋЕНОГ КОМПЛЕКСА НИКЛА(II) СА 2-АЦЕТИЛТИАЗОЛ СЕМИКАРБАЗОНОМ 84

Marija Pavlović, Mima Jevtović, Maja Šumar Ristović, Božidar Čobeljić
SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF A DINUCLEAR AZIDO-BRIDGED NICKEL(II) COMPLEX WITH 2-ACETYLTHIAZOLE SEMICARBAZONE 85

Биљана Пећанин, Славица Малетић, Наташа Јовић Орсини, Драгана Грујић, Бранка Ружичић, Мања Куречич, Ален Ерјавец, Бланка Шкипина
СТРУКТУРНА АНАЛИЗА МИКРО- И НАНО-$SrTiO_3$ ПРАХОВА И ЊИХОВА УЛОГА У ПОЛИМЕРНИМ КОМПОЗИТИМА 86

Biljana Pećanin, Slavica Maletić, Nataša Jović Orsini, Dragana Grujić, Branka Ružičić, Manja Kurečič, Alen Erjavec, Blanka Škipina
STRUCTURAL INSIGHTS INTO MICRO- AND NANO-$SrTiO_3$ POWDERS AND THEIR ROLE AS FILLERS IN POLYMER COMPOSITES 87

Tamara A. Petrović, Ana Kandić, Jana Timotijević, Ljiljana E. Mihajlović, Stefan R. Nikolić, Antoine Dupé, Jelena M. Poljarević
PODEŠAVANJE KATALITIČKIH SVOJSTAVA RENIJUM(V)-KOMPLEKSA STRUKTURNOM MODIFIKCIJOM LIGANADA 88

Tamara A. Petrović, Ana Kandić, Jana Timotijević, Ljiljana E. Mihajlović, Stefan R. Nikolić, Antoine Dupé, Jelena M. Poljarević
MODULATING RHENIUM(V) CATALYSTS THROUGH LIGAND STRUCTURAL MODIFICATIONS 89

Маријана С. Регојевић, Милица Г. Богдановић, Мирјана М. Радановић
СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА Ni(II) СА ТЕТРАИМИНСКИМ ДЕРИВАТОМ 2,6-ДИАЦЕТИЛПИРИДИНА 90

Marijana S. Regojević, Milica G. Bogdanović, Mirjana M. Radanović
STRUCTURE OF A NOVEL Ni(II) COMPLEX WITH A TETRAIMINE DERIVATIVE OF 2,6-DIACETYLPYRIDINE 91

Александра Ђурђевић Ђелмаш, Данило Трајковић, Милица Радибратовић, Јована Ракоњац, Карла Милчић, Милош Милчић
ПФАС КАО ПОТЕНЦИЈАЛНИ МОДУЛАТОРИ ФУНКЦИЈЕ ХУМАНОГ ХЕМОГЛОБИНА 92

Aleksandra Đurđević Đelmaš, Danilo Trajković, Milica Radibratović, Jovana Rakonjac, Karla Milčić, Miloš Milčić
PFAS AS POTENTIAL MODULATORS OF HUMAN HEMOGLOBIN FUNCTION 93

Маријана С. Регојевић, Марко В. Родић, Мирјана М. Радановић
Cu(I)/Cu(II) КОМПЛЕКС СА 2,6-ДИАЦЕТИЛПИРИДИН-БИС(ФЕНИЛХИДРАЗОНОМ) 94

Marijana S. Regojević, Marko V. Rodić, Mirjana M. Radanović
Cu(I)/Cu(II) MIXED-VALENCE COMPLEX WITH 2,6-DIACETYLPYRIDINE-BIS(PHENYLHYDRAZONE) 95

Весна Рибић, Ивана С. Вељковић, Душан Ж. Вељковић
С-Н/О-М ИНТЕРАКЦИЈЕ ИЗМЕЂУ АРОМАТИЧНИХ С-Н ДОНОРА И КИСЕОНИЧНИХ ЛИГАНАДА 96

Vesna Ribić, Ivana S. Veljković, Dušan Ž. Veljković
C-H/O-M INTERACTIONS BETWEEN AROMATIC C-H DONORS AND OXYGEN-CONTAINING LIGANDS 97

Предраг Ристић, Вељко Ђокић, Јасминка Поповић, Ненад Филиповић, Тамара Тодоровић
СИНТЕЗА, КРИСТАЛОГРАФСКА АНАЛИЗА И ФОТОКАТАЛИТИЧКА АКТИВНОСТ Ag(I) КООРДИНАЦИОНИХ ПОЛИМЕРА СА ЛИГАНДИМА НА БАЗИ ТИОМОРФОЛИНА И ПИПЕРАЗИНА 98

Predrag Ristić, Veljko Đokić, Jasminka Popović, Nenad Filipović, Tamara Todorović
SYNTHESIS, CRYSTALLOGRAPHIC ANALYSIS, AND PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF Ag(I) COORDINATION POLYMERS WITH THIOMORPHOLINE- AND PIPERAZINE-BASED LIGANDS 99

Milica Savić, Mima Jevtović, Matija Zlatar, Božidar Čobeljić
KOMPARATIVNA BIOLOŠKA AKTIVNOST Mn(II) I Zn(II) HIDRAZONSKIH KOMPLEKSA 100

Milica Savić, Mima Jevtović, Matija Zlatar, Božidar Čobeljić
COMPARATIVE BIOLOGICAL ACTIVITY OF Mn(II) AND Zn(II) HYDRAZONE COMPLEXES 101

Snežana Selaković, Milica Savić, Maja Gruden, Maja Šumar Ristović
FORMIRANJE MONONUKLEARNOG KOMPLEKSA NIKLA(II) SA 2-ACETILTIAZOL SEMIKARBAZONOM 102

Snežana Selaković, Milica Savić, Maja Gruden, Maja Šumar Ristović
FORMATION OF A MONONUCLEAR NICKEL(II) COMPLEX WITH 2-ACETYLTHIAZOLE SEMICARBAZONE 103

Невена Стевановић, Мима Јевтовић, Теодора Витомиров, Маја Груден
СИНТЕЗА И СТРУКТУРНА КАРАКТЕРИЗАЦИЈА АЗИДО-ПРЕМОШЋЕНОГ ДИНУКЛЕАРНОГ КОБАЛТ(III) КОМПЛЕКСА СА СЕМИКАРБАЗОНСКИМ ЛИГАНДОМ 104

Nevena Stevanović, Mima Jevtović, Teodora Vitomirov, Maja Gruden
STRUCTURAL ELUCIDATION OF AN AZIDE-BRIDGED DINUCLEAR COBALT(III) COMPLEX WITH A SEMICARBAZONE LIGAND 105

Ivan Stefanović, Jasna Džunuzović, Enis Džunuzović, Carla Marega
XRD STUDIJA POLIURETAN/TiO_2 NANOKOMPOZITA 106

Ivan Stefanović, Jasna Džunuzović, Enis Džunuzović, Carla Marega
XRD STUDY OF THE POLYURETHANE/TiO_2 NANOCOMPOSITES 107

Павле Танчић, Марко Родић, Александар Кременовић, Љиљана Карановић
ПОКАЗАТЕЉИ СТРУКТУРНЕ ДЕСИМЕТРИЗАЦИЈЕ КОД $Grs_{58–64}Adr_{36–41}Sps_2$ ГРАНДИТА ОДРЕЂЕНИ МЕТОДОМ РЕНДГЕНСКЕ ДИФРАКЦИЈЕ НА МОНОКРИСТАЛУ 108

Pavle Tančić, Marko Rodić, Aleksandar Kremenović, Ljiljana Karanović
INDICATORS OF THE STRUCTURAL DISSYMETRIZATION OF THE $Grs_{58–64}Adr_{36–41}Sps_2$ GRANDITE DETERMINED WITH THE SINGLE CRYSTAL X-RAY DIFFRACTION METHOD 109

Жељко Јаћимовић, Зоран Д. Томић, Франц Пердих, Милица Вујић
СУПРАМОЛЕКУЛСКА СВОЈСТВА КРИСТАЛНИХ СТРУКТУРА $[Mn(OAc)_2L_4]$ (L = 4-МЕТИЛПИРАЗОЛ) И СТРУКТУРНО СЛИЧНИХ ЈЕДИЊЕЊА 110

Željko Jaćimović, Zoran D. Tomić, Franc Perdih, Milica Vujić
SUPRAMOLECULAR FEATURES OF THE CRYSTAL STRUCTURES OF $[Mn(OAc)_2L_4]$ (L = 4-METHYLPYRAZOLE) AND RELATED COMPOUNDS 111

Александра Ђурђевић Ђелмаш, Данило Трајковић, Милица Радибратовић, Драган Нинковић, Карла Милчић, Милош Милчић
АНАЛИЗА ВЕЗИВАЊА ПФАС ЗА ХУМАНИ α2-МАКРОГЛОБУЛИН: УЛОГА ФУНКЦИОНАЛНО ЗНАЧАЈНОГ ЦИСТЕИНСКОГ ОСТАТКА 112

Aleksandra Đurđević Đelmaš, Danilo Trajković, Milica Radibratović, Dragan Ninković, Karla Milčić, Miloš Milčić
ANALYSIS OF PFAS BINDING TO HUMAN α2-MACROGLOBULIN: THE ROLE OF A FUNCTIONALLY RELEVANT CYSTEINE RESIDUE 113

Кристина Гак Симић, Александра Машуловић, Лидија Радовановић, Немања Тришовић, Olivier Jeannin, Franck Camerel, Ивана Ђорђевић
СУПРАМОЛЕКУЛСКА ОРГАНИЗАЦИЈА ТЕЧНОКРИСТАЛНОГ ДЕРИВАТА АЗОПИРИДИНА 114

Kristina Gak Simić, Aleksandra Mašulović, Lidija Radovanović, Nemanja Trišović, Olivier Jeannin, Franck Camerel, Ivana Đorđević
SUPRAMOLECULAR ORGANIZATION OF A LIQUID-CRYSTALLINE AZOPYRIDINE DERIVATIVE 115

Марија Шуљагић, Љубица Анђелковић, Вукосава Живковић Радовановић, Александар Кременовић, Владимир Павловић, Милош Огњановић
УТИЦАЈ ПАРАМЕТАРА СИНТЕЗЕ НА СТРУКТУРНА И АНТИБАКТЕРИЈСКА СВОЈСТВА α-Bi_2O_3 ЧЕСТИЦА 116

Marija Šuljagić, Ljubica Anđelković, Vukosava Živković Radovanović, Aleksandar Kremenović, Vladimir Pavlović, Miloš Ognjanović
INFLUENCE OF SYNTHESIS PARAMETERS ON STRUCTURAL AND ANTIBACTERIAL PROPERTIES OF α-Bi_2O_3 PARTICLES 117

Теодора Витомиров, Мима Јевтовић, Невена Стевановић, Маја Шумар Ристовић
ФОРМИРАЊЕ МОНОНУКЛЕАРНОГ КОМПЛЕКСА НИКЛА(II) СА 2-АЦЕТИЛТИАЗОЛ СЕМИКАРБАЗОНОМ ПОТПОМОГНУТО ТИОЦИЈАНАТОМ: СИНТЕЗА, КРИСТАЛНА СТРУКТУРА И ИЦ АНАЛИЗА 118

Teodora Vitomirov, Mima Jevtović, Nevena Stevanović, Maja Šumar Ristović
THIOCYANATE-ASSISTED FORMATION OF A MONONUCLEAR NICKEL(II) COMPLEX WITH A 2-ACETYLTHIAZOLE SEMICARBAZONE: SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURE AND IR ANALYSIS..... 119

Aleksander Rečnik, Vesna Ribić, Zsombor Molnár, Péter Pekker, Péter Németh, István Dódony, Mihály Pósfai, Pavel N. Gavryushkin
THE ORIGIN OF SUPERSTRUCTURE REFLECTIONS IN BIOGENIC, GEOLOGICAL, SPELEOTHEM, AND SYNTHETIC ARAGONITE 120

ПЛЕНАРНА ПРЕДАВАЊА

PLENARY LECTURES

BRIDGING EXPERIMENT AND THEORY: DYNAMIC QUANTUM CRYSTALLOGRAPHY FOR EXPLORING POLYMORPHISM

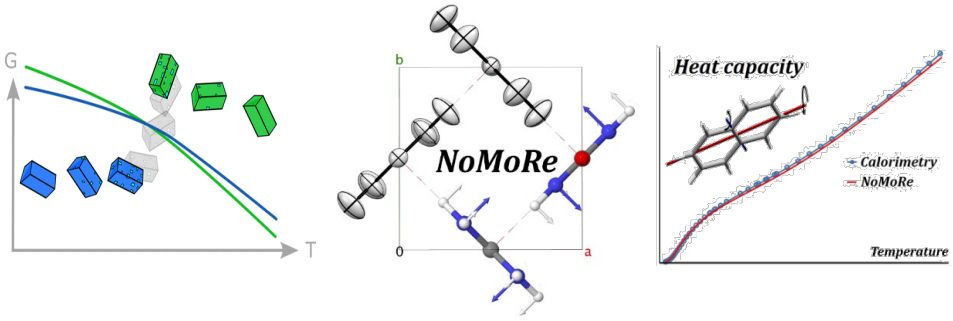
Anna Hoser [a] https://orcid.org/0000-0002-6799-3073

[a] *Faculty of Chemistry, University of Warsaw, ul. Pasteura 1 02-093 Warszawa, Poland*
e-mail: a.hoser@uw.edu.pl

Polymorphism–the ability of a compound to exist in at least two different arrangements of the molecules of that compound in the solid state–remains one of the key challenges in understanding the structure–property relationships of molecular materials [1]. Different polymorphic forms may differ significantly in solubility, stability, mechanical behaviour, or thermodynamic properties, making the identification of the most stable form and the prediction of potential undiscovered structures an essential yet difficult task. These difficulties arise not only from the subtle energetic differences between polymorphs, but also from the need to accurately account for lattice dynamics and entropy, which remain challenging for purely theoretical approaches.

In this contribution, I will present the Normal Mode Refinement (NoMoRe) method [2–4], developed by us, in which selected vibrational mode frequencies obtained from periodic DFT calculations are refined directly against high-quality single-crystal X-ray diffraction data. This approach allows us to obtain highly accurate anisotropic displacement parameters (ADPs), including for hydrogen atoms, and enables the extraction of thermodynamic properties such as heat capacities and entropies for molecular crystals–quantities that remain difficult to compute with sufficient precision using theoretical methods alone. By refining vibrational contributions against experimental data, NoMoRe effectively bridges computational models and real crystal behaviour, offering a unique route to quantifying subtle energetic differences between polymorphs.

By merging theory and experiment, we aim to achieve a deeper, quantitatively accurate understanding of the stability and energetic landscape of molecular crystals. I will present case studies–focusing mostly on systems studied within COST project (for benzophenone). Finally, I will show new results of our latest developments (initial models from machine learning potential for NoMoRe applied to benzophenone polymorphs) and I will discuss possibilities of using NoMoRe for improving refinement of single crystal X-ray diffraction data.



[1] J. Bernstein, *"Polymorphism in molecular crystals"*, Second Edition, Oxford University Press, 2020.
[2] A. A. Hoser, A. Ø. Madsen, *Acta Crystallogr.*, **A72** (2016) 206–214.
[3] A. A. Hoser, M. Sztylko, D. Trzybiński, A. Ø. Madsen, *ChemCommun.*, **57** (2021) 9370–9373.
[4] H. Butkiewicz, M. Chodkiewicz, A. Ø. Madsen, A. A. Hoser, *IUCrJ*, **12** (2025) 123–136.

STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF PHASE TRANSFORMATIONS IN GALLIUM OXIDE BY TRANSMISSION ELECTRON MICROSCOPY

Ildikó Cora [a] **https://orcid.org/0000-0002-3002-7277,**
Matteo Bosi [b] **https://orcid.org/ 0000-0001-8992-0249,**
András Kovács [c] **https://orcid.org/0000-0001-8485-991x,**
Zsolt Fogarassy [a] **https://orcid.org/0000-0003-4981-1237,**
Roberto Fornari [b,d] **https://orcid.org/0000-0002-4499-8015,**
Alexander Azarov [e] **https://orcid.org/ 0000-0003-0602-9624,**
Andrej Kuznetsov [e] **https://orcid.org/0000-0003-1822-9850,**
Béla Pécz [a] **https://orcid.org/000-0002-4651-6972**

[a] *HUN-REN Centre for Energy Research, Institute of Technical Physics and Materials Science, Budapest 1121, Hungary;* [b] *IMEM-CNR, Viale delle Scienze 37/A, 43124 Parma, Italy;* [c] *Ernst Ruska-Centre for Microscopy and Spectroscopy with Electrons, Forschungszentrum Jülich, Jülich 52425, Germany;* [d] *Department of Mathematical, Physical and Computer Sciences, University of Parma, Viale delle Scienze 7/A, 43124 Parma, Italy;* [e] *University of Oslo, Department of Physics, Centre for Materials Science and Nanotechnology, PO Box 1048 Blindern, N-0316 Oslo, Norway*
e-mail: cora.ildiko@energia.mta.hu

The intrinsic properties of Ga_2O_3 make it a promising candidate for high power electronics, suitable for the fabrication of solar-blind detectors for UV-C radiation.

Besides the stable monoclinic β, other polymorphs (α, γ, κ(ε), δ) are relevant candidates for applications. The most important step in device development is the structural characterization of the polymorphs: understanding their detailed crystal structure, growth mechanism, thermal stability and phase transformations up to 900 °C, and the structural relationship between polymorphs at the atomic scale. Atomic scale studies can be achieved by conventional and scanning transmission electron microscopy (TEM) combined with elemental mapping and image simulation. Moreover, *in situ* TEM annealing is particularly a suitable method to study transformations directly.

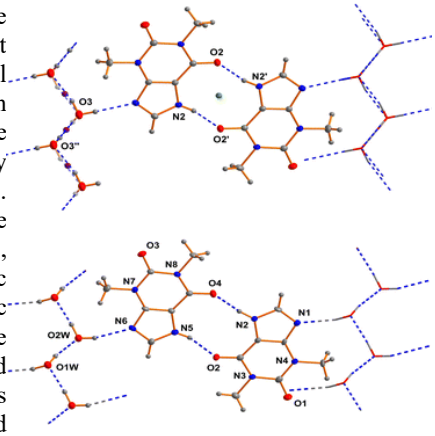
In this work we present five polymorph transformations that have been studied using *ex situ* and *in situ* TEM heating experiments. The κ → β transformation was crystallographically described *in situ* in the microscope under vacuum, and by differential scanning calorimetry. The κ → γ transformation was also studied with *ex situ* heating measurements on a κ-Ga-oxide thin film, where the role of the O_2 fugacity of the heating measurements on the transformation of the κ structure was discovered and the interfaces between κ/β and κ/γ were modelled. Our second set of TEM experiments was carried out on the radiation induced phase transformation of β-Ga_2O_3. First, the β → γ phase transformation was crystallographically described. Later, the structural and textural development of the γ → β transformation was monitored by *ex situ* heating using series of samples at different temperatures from RT up to 1100°C, and *in situ* TEM annealing experiments. The experimental data were supported by simulations using JEMS software, which uses a multislice approach to TEM image simulations.

TOO SYMMETRIC TO BE TRUE: PSEUDOSYMMETRY IN CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION

Guido J. Reiss https://orcid.org/0000-0002-3004-3955

Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Bioinorganic Chemistry, Düsseldorf, Germany
e-mail: reissg@hhu.de

Pseudosymmetry is a recurrent and structurally significant phenomenon in chemical crystallography, particularly in compounds combining highly symmetric inorganic or organometallic building units with lower-symmetry supramolecular environments. It is well known that pseudosymmetric arrangements frequently produce diffraction patterns suggestive of higher crystallographic symmetry, while subtle deviations lower the true symmetry of the crystal structure.



In polyiodide salts, the triiodide/iodine substructure often dominates the diffraction pattern, making it difficult to identify and properly treat other structural moieties that lower the overall symmetry. Such pseudosymmetric structures require special care during structure solution and are frequently associated with refinement difficulties [1]. Comparable effects are present in some alkylammonium hexahalogenidemetallate salts, where octahedral anions coexist with asymmetric organic cations resulting in pseudo-centrosymmetric crystal structures [2]. Related investigations on some butadiene transition-metal complexes demonstrated that apparently alternating C–C/C=C bond lengths may originate from unresolved pseudosymmetry and incorrect space-group assignments [3]. Redeterminations of iron-, manganese-, and chromium-butadiene carbonyl complexes revealed somehow more or less equilibrated bond lengths within the butadiene ligands after treatment of the pseudosymmetry. Even filigrane structural changes (e.g. hydrogen atom positions of water molecules (see the figure) [4]; orientation of an ammonium cation [5] etc.) may necessitate a change of the entire space group description.

[1] G. J. Reiss, J. S. Engel, *Hydrogen bonded 1,10-diammoniodecane – an example of an organo-template for the crystal engineering of polymeric polyiodides*, *CrystEngComm,* **4** (2002) 155–161.
[2] G. J. Reiss, *The pseudosymmetric structure of bis(diisopropylammonium) hexachloroiridate(IV) and its analogy to potassium hexachloroiridate(III)*, *Acta Crystallogr. E,* **58** (2002) m47–m50.
[3] G. J. Reiss and S. Konietzny, *How realistic are alternating C–C-bond lengths in s-cis-1,3-butadiene transition metal complexes? Dalton Trans.* (2002) 862–864; G. J. Reiss, *Redetermination of bis(η4-1,3-cyclohexadiene)monocarbonyliron*, *Z. Naturforsch. B,* **57** (2002) 479–482.
[4] I. S. Konovalova, S. V. Shishkina, M. Wyshusek, M. Patzer, G. J. Reiss, *Supramolecular architecture of theophylline polymorphs, monohydrate and co-crystals with iodine: study from the energetic viewpoint, RSC Adv.,* **14** (2024) 29774–29788.
[5] G. J. Reiss, *A reinvestigation of Wilm's salt, $(NH_4)_4[RhCl_6]NO_3$ – structure, spectroscopy and thermal analysis*, *Z. Kristallogr.,* **217** (2002) 550–556.

ULTRAFAST PDF: REVEALING HIDDEN NON-EQUILIBRIUM STATES IN QUANTUM MATERIALS

Emil S. Bozin [a] https://orcid.org/0000-0002-6682-0365

[a] *Center for Solid State Physics and New Materials, Institute of Physics Belgrade, Belgrade, Serbia*
e-mail: bozin@ipb.ac.rs

Understanding the evolution of quantum materials far from equilibrium demands experimental probes capable of capturing both ultrafast dynamics and local structural correlations beyond crystallographic symmetry. Ultrafast X-ray pair distribution function (uf-PDF) analysis, enabled by femtosecond X-ray free-electron lasers (XFELs), provides direct access to transient local atomic arrangements on femtosecond–picosecond timescales, revealing hidden states inaccessible to conventional diffraction (Fig. 1) [1]. Recent advances demonstrate that high-quality total scattering and PDFs can be obtained from a single ~30 fs XFEL pulse over an extended Q-range, enabling quantitative structural analysis of crystalline, nanocrystalline, amorphous, liquid, and solution-phase systems alike [2]. This capability establishes a powerful framework for resolving hierarchical lattice responses and emergent orders in correlated materials, including lattice instabilities and intertwined electronic phases [3]. Beyond quantum materials, ultrafast PDF provides a broadly applicable platform for tracking structural dynamics in catalysis, energy materials, shock-compressed liquids, nanoparticle formation, and molecular conformational changes, offering a universal approach to time-resolved total scattering across disciplines.

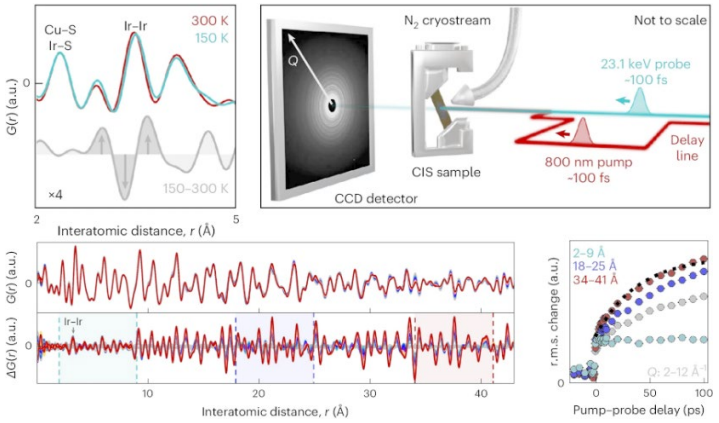


Figure 1. Resolving length-scale-dependent transient disorder through an uf-phase transition in $CuIr_2S_4$.

[1] J. Griffiths et al: "Resolving length-scale-dependent transient disorder through an ultrafast phase transition", *Nature Materials*, **23** (2024) 1041.
[2] A. F. Sapnik et al: "High-quality ultra-fast total scattering and pair distribution function data using an X-ray free-electron laser", *IUCrJ*, **12** (2025) 531.
[3] E. S. Bozin et al: "Crystallization of polarons through charge and spin ordering transitions in 1T-TaS_2", *Nature Communications*, **14** (2023) 7055.

RETHINKING CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS: BEYOND GEOMETRY

Irina S. Konovalova [a,b] https://orcid.org/0000-0001-6245-6642

[a] *Institut fur Bioanorganische Chemie Heinrich-Heine-Universitat Dusseldorf, Universitatsstrasse 1, 40225 Dusseldorf, Germany;* [b] *SSI "Institute for Single Crystals", National Academy of Science of Ukraine, 60 Nauky ave., Kharkiv, 61001, Ukraine*
e-mail: ikonovalova0210@gmail.com

Crystal structure analysis plays a crucial role in understanding the relationship between molecular arrangement and the physicochemical properties of functional materials. It provides detailed information about intermolecular interactions, polymorphism, and supramolecular organization, which are essential for the development of pharmaceuticals, advanced materials, and molecular devices.

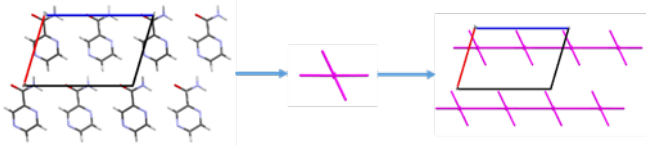


Fig. 1 Crystal packing of gamma form of pyrazinamide (on the left), energy-vector diagram of intermolecular interactions energies (in the middle), packing of energy-vector diagrams (on the right).

Most conventional approaches to molecular crystal structure analysis are primarily based on the comparison of geometric characteristics of intermolecular interactions. However, such approaches often become insufficient in complex molecular systems, particularly in the presence of numerous weak interactions or in the absence of strong directional interactions. In crystals where classical hydrogen bonds are not dominant, identification of the principal structure-directing motifs based solely on geometric considerations becomes highly challenging.

Analysis of crystal packing from an energetic perspective provides significantly deeper insight into supramolecular organization [1] (Fig.1). The major advantages of this approach include:

• Independence from the specific nature of intermolecular interactions;
• Simultaneous consideration of all interaction types, including hydrogen bonding, dispersion, electrostatic, and polarization effects;
• The possibility of moving from qualitative interpretation toward quantitative analysis of crystal structures.

The proposed methodology is based on the analysis of intermolecular interaction energies calculated using modern quantum-chemical methods, rather than relying exclusively on geometric parameters. This energy-based approach has demonstrated broad applicability to molecular crystals and enables a more comprehensive understanding of crystal packing, regardless of the presence or absence of specific intermolecular interactions.

[1] O. V. Shishkin, R. I. Zubatyuk, S. V. Shishkina, V. V. Dyakonenko, V. V. Medviediev, *Phys. Chem. Chem. Phys.,* **16** (2014) 6773–6786.

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

ПРЕДАВАЊА ПО ПОЗИВУ

INVITED LECTURES

ЈУБИЛАРНА 30. КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Љиљана Карановић https://orcid.org/0000-0001-9534-1315

Лабораторија за кристалографију, Рударско-геолошки факултет, Универзитет у Београду, Ђушина 7, 11000 Београд, Србија
e-mail: ljkaranovic@rgf.bg.ac.rs

Поводом јубиларне 30. Конференције Српског кристалографског друштва

Уводна реч

Наставак активности некадашњег Југословенског центра за кристалографију на територији Републике Србије организован је кроз рад Српског кристалографског друштва (СКД), које је основано 7. маја 1992. године на Рударско-геолошком факултету Универзитета у Београду. За првог председника изабран је академик Бела Рибар из Новог Сада, а за првог потпредседника унив. проф. др Илија Крстановић из Београда. Већ 1993. године СКД се придружио Међународној унији за кристалографију (IUCr), а затим и Европском кристалографском удружењу (ECA). Данас СКД има око 80 чланова. На до сада организованим конференцијама одржано је преко 100 пленарних предавања, више од 500 усмених презентација и представљено је више од 370 постера, који тематски покривају различите области рендгенске кристалографије. Поред домаћих научника, на конференцијама су учествовали и страни научници из еминентних кристалографских институција, најчешће као пленарни предавачи, што је допринело развоју међународне сарадње са највишим научним стандардима. Кроз квалитетне дискусије показује се потреба за проширивањем истраживања, која ће повезати различите области и методе. Кристалографија је изузетан пример научне дисциплине која се налази на раскрсници многих научних области, што потврђује њену мултидисциплинарну, интердисциплинарну и трансдисциплинарну природу. Кристалографија користи знања и методе различитих, независних научних области као што су хемија (хемијска анализа и синтеза), математика (симетрија), информациона технологија (програми за прорачуне и визуелизацију), физика (дифракција), биологија (макромолекули), итд. Истовремено, велики број научних дисциплина користи кристалографске методе. Кристалографија превазилази границе класичних дисциплина, стварајући нови, јединствени теоријски и експериментални оквир који се примењује на све области које проучавају чврсто стање. Један од циљева је образовање младих истраживача, што доприноси унапређењу кристалографије и ширењу примене њених метода у другим научним областима (минералогија, хемија, физика, наука о материјалима, агрономија, екологија, медицина, фармација, итд.). Ради повећања мотивације за успех у области кристалографије, додељује се награда, названа по кристалографу Дубравку Родићу. До сада ју је добило 12 младих истраживача.

THE JUBILEE 30TH CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Ljiljana Karanović https://orcid.org/0000-0001-9534-1315

Laboratory for Crystallography, Faculty of Mining and Geology, University of Belgrade, Đušina 7, 11000 Beolgrade, Serbia
e-mail: ljkaranovic@rgf.bg.ac.rs

On the occasion of the jubilee 30th Conference of the Serbian Crystallographic Society

An introductory speech

The continuation of the activities of the former Yugoslav Centre for Crystallography on the territory of the Republic of Serbia was organized through the work of the Serbian Crystallographic Society (SKD), which was founded on May 7, 1992 at the Faculty of Mining and Geology of the University of Belgrade. Academician Bela Ribar from Novi Sad was elected as the first president and the university professor Dr. Ilija Krstanović from Belgrade as the first vice-president of SKD. Already in 1993 SKD joined the International Union of Crystallography (IUCr) and then the European Crystallographic Association (ECA). Today SKD has about 80 members. At the conferences organized so far, over 100 plenary lectures, more than 500 oral presentations and more than 370 posters were presented, which thematically cover different areas of X-ray crystallography. In addition to domestic scientists, foreign scientists from eminent crystallographic institutions participated in the conferences, most often as plenary lecturers, which contributed to the development of international cooperation with the highest scientific standards. Through high-quality discussions, the need to expand research is shown, which will connect different areas of research and methods. Crystallography is an exceptional example of a scientific discipline that is at the crossroads of many scientific fields, which confirms its multidisciplinary, interdisciplinary and transdisciplinary nature. Crystallography uses the knowledge and methods of different, independent scientific fields such as chemistry (chemical analysis and synthesis), mathematics (symmetry), information technology (calculations and visualization software), physics (diffraction), biology (macromolecules), *etc*. At the same time, a large number of scientific disciplines use crystallographic methods. Crystallography exceeds the boundaries of classical disciplines, creating a new, unique theoretical and experimental framework that applies to all areas that study the solid state. One of the goals of SKD is the education of young researchers, which contributes to the improvement of crystallography and the spread of the application of its methods in other scientific fields (mineralogy, chemistry, physics, materials science, agronomy, ecology, medicine, pharmacy, *etc*.). To increase motivation for success in the field of crystallography, a prize is awarded, named after the crystallographer Dubravko Rodić. So far, 12 young researchers have received it.

СТРУКТУРА МЕЂУПОВРШИНЕ ХОМОЕПИТАКСИЈАЛНИХ РУТИЛНИХ ВЛАКАНА

Весна Рибић [a] https://orcid.org/ 0000-0001-8185-7433,
Вања Јордан [b] https://orcid.org/0000-0002-0551-6562,
Сандра Древ [a] https://orcid.org/0000-0002-5721-4435,
Јанез Ковач [a] https://orcid.org/0000-0002-4324-246X,
Горан Дражић [b] https://orcid.org/0000-0001-7809-8050,
Александер Речник [a] https://orcid.org/ 0000-0002-6636-8591

[a] *Институт Јожеф Стефан, Јамова цеста 39, Љубљана, Словенија;* [b] *Национални институт за хемију, Хајдрихова 19, Љубљана, Словенија*
e-mail: vesna.ribic@ijs.si

Прилагођавање повезаности наночестица омогућава дизајнирање функционалних материјала са различитим својствима. Контролом структуре међуповршине могуће је формирати међусобно повезане, разгранате материјале велике специфичне површине. У овом раду проучавана су хидротермално синтетисана рутилна влакна применом високорезолуционе ТЕМ микроскопије, аберационо кориговане СТЕМ микроскопије, ЕЕЛС, ЕДС и ХПС спектроскопије, као и ДФТ прорачуна, са циљем одређивања кристалографских и хемијских карактеристика рутил–рутил међуповршина формираних у изразито киселим условима [1].

Снимци атомске резолуције показали су да су суседна рутилна влакна раздвојена константним размаком нанометарских димензија и да поседују јединствену кристалографску конфигурацију, карактерисану бочном дилатацијом од 7/8[110] и вертикалним померањем од 1/2[001]. Оваква конфигурација међуповршине доследно је присутна кроз читаву влакнасту структуру и не може се објаснити једноставним хомоепитаксијалним растом. Површински осетљиве спектроскопске анализе показале су високо хидроксиловане и протоноване (110) површине, при чему Ti остаје искључиво у оксидационом стању Ti^{4+}. ДФТ прорачуни указују да је експериментално уочена структура међуповршине стабилизована присуством просторно ограничених молекула воде и хидроксилних група у међуповршинском простору. Специфична кристалографска транслација погодује формирању разгранатих мрежа водоничних веза, трансферу протона између премошћујућих и терминалних хидроксилних група, као и спонтаној дисоцијацији међуповршинских молекула воде. Предложен је механизам раста према којем електростатичко одбијање између протонованих површинских врста покреће прелаз из почетне хомоепитаксијалне конфигурације у експериментално потврђену транслирану структуру међуповршине. Добијени резултати указују на постојање минерал–вода међуповршине способне да задржи информацију о условима свог настанка и пренесе такво понашање на ново уведену водену средину. Ова студија наглашава кључну улогу атомске структуре међуповршине у одређивању хемијских и функционалних својстава оксидних материјала.

[1] V. Ribić, V. Jordan, S. Drev, J. Kovač, G. Dražić, A. Rečnik, *Advanced Materials*, **36 (4)** (2024) 2308027.

Захвалница: Ову студију је подржала Словеначка истраживачка агенција (АРИС) у оквиру основних финансирања П2–0084: „Наноструктурирани материјали“ и постдокторског пројекта 32–50056: „Први принципи и експериментално проучавање инверзних граница у ZnO“.

INTERFACE STRUCTURE OF HOMOEPITAXIAL RUTILE FIBERS

Vesna Ribić [a] https://orcid.org/ 0000-0001-8185-7433,
Vanja Jordan [a] https://orcid.org/0000-0002-0551-6562,
Sandra Drev [a] https://orcid.org/0000-0002-5721-4435,
Janez Kovač [a] https://orcid.org/0000-0002-4324-246X,
Goran Dražić [b] https://orcid.org/0000-0001-7809-8050,
Aleksander Rečnik [a] https://orcid.org/ 0000-0002-6636-8591

[a] *Jožef Stefan Institute, Jamova cesta 39, Ljubljana, Slovenia;* [b] *National Institute of Chemistry, Hajdrihova 19, Ljubljana, Slovenia*
e-mail: vesna.ribic@ijs.si

Tailoring nanoparticle connectivity enables the design of functional materials with diverse properties. Through engineering the interface structure, we can create interconnected, branched materials with large surface areas. Here we studied hydrothermally grown fibrous rutile by means of high-resolution TEM, aberration-corrected STEM, EELS, EDS, XPS, and DFT calculations to analyze the crystallography and chemistry of rutile–rutile interfaces formed in strongly acidic conditions.[1]

Atomic-resolution imaging revealed that adjacent rutile fibers are separated by a consistent nanoscale gap with a unique crystallographic registry, characterized by a constant dilatation of 7/8[110] and a vertical displacement of 1/2[001]. This interface configuration is consistent throughout the fibrous structure and cannot be attributed to simple homoepitaxial growth, but results from complex ionic interaction between the {110} rutile surfaces. Surface-sensitive spectroscopic analyses showed that (110) surfaces are highly hydroxylated and protonated, whereby Ti remains in the Ti^{4+} oxidation state. DFT calculations indicated that the interfaces are stabilized by the presence of entrapped interfacial water molecules and hydroxyl species. The observed crystallographic shifts result from interconnected hydrogen-bond networks, proton transfer between bridging and terminal hydroxyl groups, and the spontaneous dissociation of interfacial water molecules. The proposed growth mechanism involves electrostatic repulsion between protonated surface species, which drives the transition from the initial homoepitaxial configuration to the experimentally observed translated interface structure. These findings uncover a mineral–water interface capable of retaining information about its formation environment and transferring this behavior to the aqueous medium. The study highlights the important role of atomic-scale interface engineering in the design of functionally diverse oxide materials.

[1] V. Ribić, V. Jordan, S. Drev, J. Kovač, G. Dražić, A. Rečnik, *Advanced Materials*, **36 (4)** (2024) 2308027.

Acknowledgement: This study was supported by the Slovenian Research Agency (ARIS) under core fundings P2–0084: "Nanostructured materials" and the postdoctoral project Z2–50056: "First principles and experimental study of inversion boundaries in ZnO.

УСМЕНА САОПШТЕЊА

ORAL PRESENTATIONS

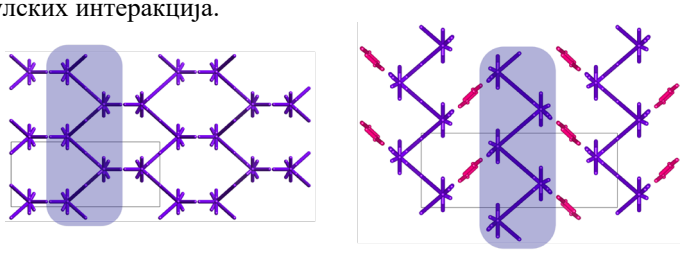
СЛИЧНОСТ СЛОЈЕВА У АНХИДРОВАНОМ И ХИДРАТИСАНОМ КРИСТАЛНОМ ОБЛИКУ ТИОСЕМИКАРБАЗОНА ХИНУКЛИДИНОНА: РЕЗУЛТАТИ АНАЛИЗЕ ПАКОВАЊА У КРИСТАЛУ И ЕНЕРГИЈА МЕЂУМОЛЕКУЛСКИХ ИНТЕРАКЦИЈА

Марко В. Родић [а] https://orcid.org/0000-0002-4471-8001,
Милица Г. Богдановић [а] https://orcid.org/0000-0001-7122-6929,
Видак Раичевић [б] https://orcid.org/0000-0002-3858-4350,
Guido J. Reiss [в] https://orcid.org/0000-0002-3004-3955,
Irina S. Konovalova [в,г] https://orcid.org/0000-0001-6245-6642

[а] *Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Нови Сад, Србија;* [б] *Универзитет у Новом Саду, Медицински факултет, Нови Сад, Србија;* [в] *Heinrich-Heine-Universitat Dusseldorf, Institut fur Bioanorganische Chemie, Dusseldorf, Germany;* [г] *SSI "Institute for Single Crystals", National Academy of Science of Ukraine, Kharkiv, Ukraine*
e-mail: marko.rodic@dh.uns.ac.rs

Кристалне структуре анхидрованог (**1**) и хидратисаног (**2**) облика тиосемикарбазона хинуклидинонона упоредно су анализиране ради разјашњења структурних и енергијских детерминанти њиховог кристалног уређења. У обе структуре, органски молекули су повезани N–H···N и N–H···S водоничним везама, формирајући ланце дуж 2_1 завртањских оса, градећи неуобичајен супрамолекулски мотив међу тиосемикарбазонима. Додатно, обе структуре задржавају бочно слагање ланаца тиосемикарбазона, дајући заједнички слојевити распоред стабилизован претежно дисперзионим интеракцијама.

Израчунавање енергије решетке показало је да је хидрат (ΔE_{latt} = −208 kJ mol^{-1}) термодинамички стабилнији од анхидрата (ΔE_{latt} = −147 kJ mol^{-1}), услед додатне стабилизације коју уводе молекули воде и формирања већег броја јаких међумолекулских интеракција.



а) б)

Слика 1. Дијаграми енергијских вектора за **1** (а) и **2** (б)

Захвалница: Истраживања је подржало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Ев. бр. 451-03-33/2026-03/200125 і 451-03-34/2026-03/200125) 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).

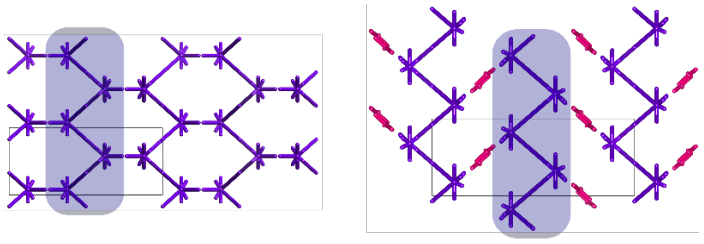
LAYER SIMILARITY IN THE ANHYDROUS AND HYDRATED CRYSTAL FORMS OF QUINUCLIDINONE THIOSEMICARBAZONE: INSIGHTS FROM CRYSTAL PACKING AND INTERMOLECULAR INTERACTION ENERGY ANALYSIS

Marko V. Rodić [a] https://orcid.org/0000-0002-4471-8001,
Milica G. Bogdanović [a] https://orcid.org/0000-0001-7122-6929,
Vidak Raičević [b] https://orcid.org/0000-0002-3858-4350,
Guido J. Reiss [c] https://orcid.org/0000-0002-3004-3955,
Irina S. Konovalova [c,d] https://orcid.org/0000-0001-6245-6642

[a] *University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Novi Sad, Serbia;* [b] *University of Novi Sad, Faculty of Medicine, Novi Sad, Serbia;* [c] *Heinrich-Heine-Universitat Dusseldorf, Institut fur Bioanorganische Chemie, Dusseldorf, Germany;* [d] *SSI "Institute for Single Crystals", National Academy of Science of Ukraine, Kharkiv, Ukraine*
e-mail: marko.rodic@dh.uns.ac.rs

Crystal structures of anhydrous (**1**) and monohydrated (**2**) forms of quinuclidinone thiosemicarbazone were comparatively analyzed to elucidate structural and energetic determinants of their crystal architectures. In both structures, organic molecules are linked by N–H···N and N–H···S hydrogen bonds forming chains along the 2_1 screw axes forming an uncommon supramolecular motif among thiosemicarbazones. Additionaly, both structures preserve the lateral packing of thiosemicarbazone chains, yielding a common layered arrangement stabilized predominantly by dispersion forces.

Lattice energy calculations revealed that the hydrate (ΔE_{latt} = −208 kJ mol^{-1}) is thermodynamically more stable than the anhydrate (ΔE_{latt} = −147 kJ mol^{-1}), owing to the additional stabilization introduced by water molecules and the increased number of strong intermolecular interactions.



a) b)

Figure 1. Energy vector diagrams of **1** (a) and **2** (b)

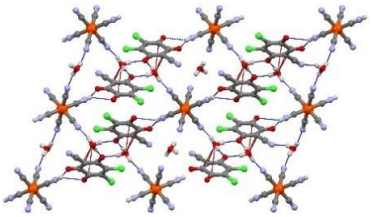
Acknowledgement: This research was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-33/2026-03/200125 & 451-03-34/2026-03/200125) and German–Serbian joint scientific co-operation project: Application of quantum-crystallographic methods in extended routine X-ray structural analysis of small molecules (Grant No. 337-00-253/2023-05/12).

ПРОТОНОВАНИ ПОЛИЦИЈАНОМЕТАЛАТИ КАО ПРОМОТЕРИ O···π ИНТЕРАКЦИЈА, ИСПИТИВАЊЕ МОДИФИКОВАНОГ 2,3-ДИХЛОРО-5,6-ДИЦИЈАНО-*p*-БЕНЗОХИНОНА И ЊЕГОВИХ НЕКОВАЛЕНТНИХ ИНТЕРАКЦИЈА

Никола Јакупец [a] https://orcid.org/0000-0002-3979-0690,
Michael Bodensteiner [b] https://orcid.org/0000-0002-1850-5192,
Крешимир Молчанов [a] https://orcid.org/0000-0002-4328-3181

[a] *Департман за физичку хемију, Институт Руђер Бошковић, Бијеничка цеста 54, 10000 Загреб, Хрватска;* [b] *Факултет за хемију и фармацију, Универзитет у Регенсбургу, Universitätsstraße 31, 93053 Регенсбург, Немачка*
e-mail: njakupec@irb.hr

Протоновани полицијанометалати (PPCM, уобичајна формула: $H_y[M(CN)_x]$) су јаке киселине и ретко се користе у кристалографији због своје реактивности на ваздуху и склоности ка разлагању у Пруско плаво [1]. Међутим, они су добри кандидати за обезбеђивање киселе средине због својих изузетно ниских pK_a вредности (обично < 1). Постоје студије у којима су PPCM коришћени за остваривање и водоничних и халогених веза [2]. Међутим, нису спроведена друга истраживања о омогућавању нековалентних интеракција помоћу PPCM једињења. У овом раду покушали смо да модификујемо 2,3-дихлоро-5,6-дицијано-*p*-бензохинон (DDQ) нуклеофилном адицијом и супституцијом у изразито киселој средини коју омогућавају PPCM једињења. SCXRD анализа добијених производа показује да су остварене интра- и интермолекулске O···π интеракције (слика 1). Природа ових интеракција испитивана је анализом густине наелектрисања, Хиршфелдовим утачњавањем атома и анализом електростатичког потенцијала мапираног на Хиршфелдову површину молекула.



Слика 1. Кристално паковање у систему са супституисаним DDQ, приказ дуж кристалографске *b* осе. O···π интеракције су обојене црвеном бојом, водоничне везе су обојене плавом бојом.

[1] A. G. Sharpe, *The Chemistry of Cyano Complexes of the Transition Metals,* Academic Press, Cambrigde, 1976.
[2] N. Jakupec, L. Fotović, V. Stilinović, *CrystEngComm*, **22** (2020) 8142–8150.

Захвалница: Аутори би желели да се захвале Хрватској заклади за знаност на финансирању овог истраживања у оквиру пројекта IP-2024-05-8711.

PROTONATED POLYCYANOMETALLATES AS FACILITATORS OF O···π INTERACTIONS, AN EXAMINATION OF MODIFIED 2,3-DICHLORO-5,6-DICYANO-*p*-BENZOQUINONE AND ITS NONCOVALENT INTERACTIONS

Nikola Jakupec [a] https://orcid.org/0000-0002-3979-0690,
Michael Bodensteiner [b] https://orcid.org/0000-0002-1850-5192,
Krešimir Molčanov [a] https://orcid.org/0000-0002-4328-3181

[a] *Department of Physical Chemistry, Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Croatia;* [b] *Faculty of Chemistry and Pharmacy, University of Regensburg, Universitätsstraße 31, 93053 Regensburg, Germany*
e-mail: njakupec@irb.hr

Protonated polycyanometallates (PPCMs, common formula: $H_y[M(CN)_x]$) are strong acids and are seldom used in crystallography due to their reactivity to air and proclivity to decompose into Prussian blue [1]. However, they are good candidates for facilitating acidic media due to their extremely low pK_a values (usually < 1). There have been studies utilizing PPCMs to achieve both hydrogen and halogen bonding [2]. However no other investigations on facilitation of noncovalent interactions by PPCMs have been undertaken. In this work we have ventured to modify 2,3-dichloro-5,6-dicyano-*p*-benzoquinone (DDQ) by nucleophilic addition and substitution in highly acidic media achieved by PPCMs. SCXRD study of the obtained products shows O···π intra- and intermolecular interactions have been achieved (Figure 1). The nature of these interactions has been investigated using charge density analysis, Hirshfeld atom refinement and analysis of electrostatic potential mapped onto the Hirshfeld surface of the molecule.

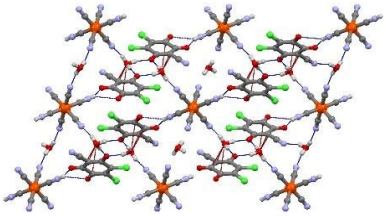


Figure 1. Crystal packing in a system with substituted DDQ, view along the crystallographic *b* axis. O···π interactions are colored red, hydrogen bonds are colored blue.

[1] A. G. Sharpe, *The Chemistry of Cyano Complexes of the Transition Metals,* Academic Press, Cambrigde, 1976.
[2] N. Jakupec, L. Fotović, V. Stilinović, *CrystEngComm*, **22** (2020) 8142–8150.

Acknowledgement: The authors would like to acknowledge the Croatian Science Foundation for funding this research under project IP-2024-05-8711.

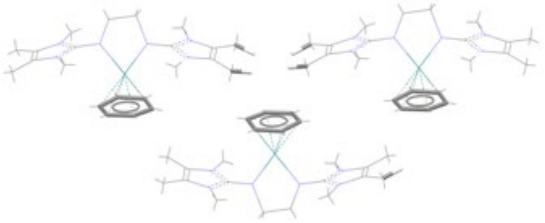
БЕНЗЕН НА ГРАНИЦИ CH/π ИНТЕРАКЦИЈА: CSD И DFT СТУДИЈА

Андреј Дедић [a] https://orcid.org/0009-0005-8723-1243,
Горан Богдановић [a] https://orcid.org/0000-0002-4721-794X,
Слађана Новаковић [a] https://orcid.org/0000-0002-8737-5870

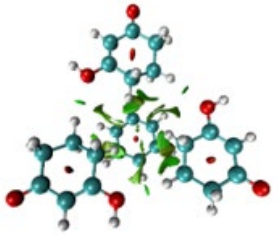
[a] *Институт за нуклеарне науке Винча - Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Београд, Србија*
e-mail: andrej.dedic@vin.bg.ac.rs

CH/π интеракција представља слабу, али важну нековалентну интеракцију у молекулском препознавању, која настаје између слабо киселих CH група и π-система богатих електронима. Поред појединачних контаката, све више доказа указује да присуство више интеракција усмерених ка једном ароматичном прстену може значајно утицати на стабилност и структурну организацију тродимензионалних молекулских архитектура [1].

У овом раду смо проучавали вишеструке CH/π интеракције које укључују бензен као слободан молекул или координован за метални центар у Кембричкој бази структурних података (CSD). Укупно су идентификоване 32 структуре, од којих је само једна садржала координовани бензенов прстен, рефкод MUGMOR (слика 1). Ова структура је такође показала највећи број CH/π интеракција усмерених ка једној страни ароматичног прстена, укупно четири интеракције.



Слика 1. MUGMOR са четири CH/π интеракције.



Слика 2. NCI анализа FACROQ.

Такође смо спровели прорачуне како бисмо проценили јачину одабраних CH/π интеракција и испитали могуће кооперативне ефекте између више интеракција усмерених ка истом ароматичном прстену. Прорачуни су изведени на нивоу теорије B3LYP-D3/def2-QZVPP. Као што је приказано у NCI анализи (слика 2), у структури FACROQ може се уочити више области интеракција, што указује на присуство више нековалентних интеракција у систему.

[1] M. Nishio, Y. Umezawa, K. Honda, S. Tsuboyama and H. Suezawa, *CrystEngComm*, **11** (2009) 1757–1788.

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

BENZENE AT THE LIMIT OF CH/π INTERACTIONS: CSD AND DFT STUDY

Andrej Dedić [a] https://orcid.org/0009-0005-8723-1243,
Goran Bogdanović [a] https://orcid.org/0000-0002-4721-794X,
Slađana Novaković [a] https://orcid.org/0000-0002-8737-5870

[a] *VINČA Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*
e-mail: andrej.dedic@vin.bg.ac.rs

The CH/π interaction is a subtle but important noncovalent interaction in molecular recognition, arising between weakly acidic CH groups and electron-rich π-systems. Beyond isolated CH/π contacts, increasing evidence suggests that the presence of multiple interactions directed toward a single aromatic ring can strongly influence the stability and structural organization of three-dimensional molecular architectures [1].

In this work, we investigated multiple CH/π interactions involving benzene either as a free molecule or coordinated to a metal center in Cambridge Structural Database (CSD). A total of 32 structures were identified, of which only one contained a coordinated benzene ring, refcode MUGMOR (Figure 1). This structure also exhibited the highest number of CH/π interactions directed toward one side of the aromatic ring, with a total of four interactions.

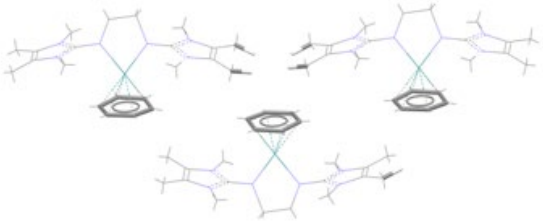


Figure 1. MUGMOR showing four CH/π interactions.

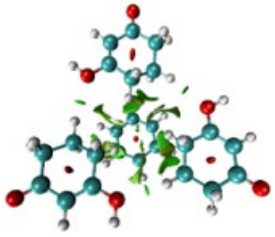


Figure 2. NCI analysis FACROQ.

We also performed calculations to evaluate the strength of selected CH/π interactions and to examine the possible cooperative effects between multiple interactions directed toward the same aromatic ring. The calculations were performed at the B3LYP-D3/def2-QZVPP level of theory. As shown in the NCI analysis (Figure 2), multiple interaction regions can be identified in the FACROQ structure, indicating the presence of several noncovalent interactions within the system.

[1] M. Nishio, Y. Umezawa, K. Honda, S. Tsuboyama and H. Suezawa, *CrystEngComm*, **11** (2009) 1757–1788.

Acknowledgement: Authors acknowledge the support of the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia.

ЗАВИСНОСТ ЛУМИНЕСЦЕНТНИХ СВОЈСТАВА ОД СТРУКТУРНИХ КАРАКТЕРИСТИКА LnMOF-ОВА

Dimitrije Mara [a] https://orcid.org/0000-0001-7737-8966,
Frankline Keming Ndula [b] https://orcid.org/0009-0000-5496-7573,
Zhiwang Cai [b] https://orcid.org/0000-000x-xxxx-xxxx,
Flavia Artizzu [c] https://orcid.org/0000-0003-3773-2806,
Thierry Verbiest [d] https://orcid.org/0000-0002-0822-176X,
Rik Van Deun [b] https://orcid.org/0000-0001-7091-6864

[a] *Functional Molecular Materials lab – FM2 Lab, Institute of General and Physical Chemistry, Studentski trg 12/V, 11158, P. O. Box 45, Belgrade, Serbia;* [b]*Luminescent Lanthanide Lab – L*^{3}*, Department of Chemistry, Ghent University, Krijgslaan 281-S3, 9000, Ghent, Belgium;* [c] *LumiMol Lab, Department of Sustainable Development and Ecological Transition (DISSTE), University of Eastern Piedmont "A. Avogadro", piazza S. Eusebio 5, 13100, Vercelli, Italy;* [d] *Molecular Imaging and Photonics, Departnemt of Chemistry, KU Leuven, Celestijnenlaan 200D, 3001, Leuven, Belgium*
e-mail: dmara@iofh.bg.ac.rs

Метално-органске мреже (MOF-ови) су кристални порозни молекулски материјали који се састоје од органских молекула (линкера) и металних центара, у овом случају јона лантаноида (Ln). Последњих година, ови материјали су се истакли као нова класа материјала за примену у фотоници, као што су чврстотелно осветљење, ласери, нелинеарна и квантна оптика [1,2]. У овом раду представљамо серију LnMOF-ова допираних јонима тербијума (Tb^{3+}), еуропијума (Eu^{3+}), диспрозијума (Dy^{3+}) и самаријума (Sm^{3+}) са 1,3,5-бензентрикарбоксилном киселином (H_3BTC) као линкером, синтетисаних солвотермално, као и "bench-top" методом за узорке са Eu^{3+}. Процес кристализације је праћен *in situ* помоћу технике нелинеарног расејања, што је показало да LnBTC MOF-ови кристалишу у нецентросиметричним просторним групама. TbBTC кристалише у тетрагоналној $P4_122$ просторној групи, док EuBTC кристалише у тетрагоналној $P4_322$ просторној групи. LnBTC MOF-ови су показали оптички одзив у линеарној (једнофотонској) и нелинеарној (мултифотонској, генерација другог хармоника (SHG)) спектроскопији и нелинеарној микроскопији. Захваљујући својим јединственим карактеристикама, ови MOF-ови представљају обећавајуће изворе светлости за квантну оптику, као што су нови извори појединачних фотона, спрегнутих фотона, итд.

[1] C. Cong; *et al. Adv. Optical Mater.*, **9** (2021) Art. No. 2100733.
[2] Y. Wan; *et al. Inorg. Chem.*, **60** (2021) 7345–7350.

Захвалница: Д. М. се захваљује на финансирању Министарству науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије, према Уговору бр. 451-03-33/2026-03/200051.

RELATIONSHIP BETWEEN STRUCTURAL PROPERTIES ON LUMINESCENT PROPERTIES OF LnMOFs

Dimitrije Mara [a] https://orcid.org/0000-0001-7737-8966,
Frankline Keming Ndula [b] https://orcid.org/0009-0000-5496-7573,
Zhiwang Cai [b] https://orcid.org/0000-000x-xxxx-xxxx,
Flavia Artizzu [c] https://orcid.org/0000-0003-3773-2806,
Thierry Verbiest [d] https://orcid.org/0000-0002-0822-176X,
Rik Van Deun [b] https://orcid.org/0000-0001-7091-6864

[a] *Functional Molecular Materials lab – FM2 Lab, Institute of General and Physical Chemistry, Studentski trg 12/V, 11158, P. O. Box 45, Belgrade, Serbia;* [b]*Luminescent Lanthanide Lab – L*^{3}*, Department of Chemistry, Ghent University, Krijgslaan 281-S3, 9000, Ghent, Belgium;* [c] *LumiMol Lab, Department of Sustainable Development and Ecological Transition (DISSTE), University of Eastern Piedmont "A. Avogadro", piazza S. Eusebio 5, 13100, Vercelli, Italy;* [d] *Molecular Imaging and Photonics, Departnemt of Chemistry, KU Leuven, Celestijnenlaan 200D, 3001, Leuven, Belgium*
e-mail: dmara@iofh.bg.ac.rs

Metal-organic frameworks (MOFs) are crystalline porous molecular materials which consist of organic molecules (linkers) and metal centers in this case lanthanide (Ln) ions. In recent years, these materials have emerged as a new class of materials for photonics applications such as solid-state lighting, lasing, nonlinear and quantum optics [1,2]. In this work, we present a series of LnMOFs doped with terbium (Tb^{3+}) and europium (Eu^{3+}), dysprosium (Dy^{3+}) and samarium (Sm^{3+}) ions with 1,3,5-benzenetricarboxylic acid (H_3BTC) as linker synthesized by solvothermal and bench top synthesis for Eu^{3+} samples. The crystallization process was monitored *in situ* using nonlinear scattering techniques and showed that the LnBTC MOFs crystallize in non-centrosymmetric space groups. TbBTC crystallizes in the tetragonal $P4_122$ space group, while the EuBTC crystallizes in the tetragonal $P4_322$ space group. LnBTC MOFs have shown the optical response in both linear (one-photon) and nonlinear (multi-photon, second harmonic generation (SHG)) spectroscopy and nonlinear microscopy. Due to their unique characteristics, these MOFs represent promising light sources for quantum optics such as new sources of single photons, entangled photons, etc.

[1] C. Cong; *et al. Adv. Optical Mater.*, **9** (2021) Art. No. 2100733.
[2] Y. Wan; *et al. Inorg. Chem.*, **60** (2021) 7345–7350.

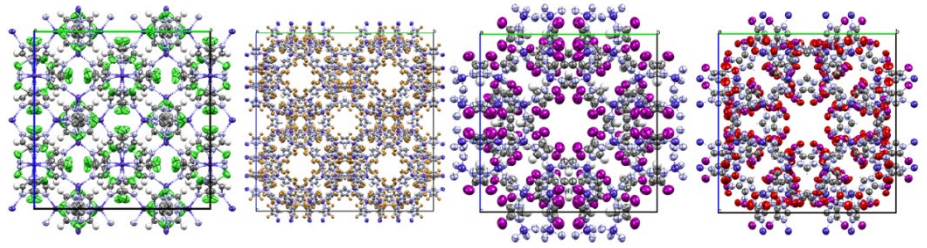
Acknowledgement: D. M. thanks for funding the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia Contract no. 451-03-33/2026-03/200051.

КРИСТАЛОХЕМИЈА КОБАЛТОВИХ ЗЕОЛИТНИХ ИМИДАЗОЛАТНИХ УМРЕЖЕНИХ СТРУКТРА СА 4,5-ДИСУПСТИТУИСАНИМ ИМИДАЗОЛСКИМ ЛИНКЕРИМА

Андреј Миливојац [a] https://orcid.org/0009-0009-7123-6153,
Александар Вишњевац [b] https://orcid.org/0000-0002-4382-6908,
Јасминка Поповић [b] https://orcid.org/0000-0003-0800-2249,
Тамара Тодоровић [c] https://orcid.org/0000-0002-7740-3639

[a] *Иновациони центар Хемијског факултета, Студентски трг 12-16, Београд, Србија;* [b] *Институт Руђер Бошковић, Бијеничка цеста 54, Загреб, Хрватска;*
[c] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија*
e-mail: andrejm@chem.bg.ac.rs

Зеолитне имидазолатне умрежене структуре на бази кобалта (Co-ZIF) представљају важну потклasu метал-органских умрежених структура (MOF) захваљујући својој структурној разноврсности, великој специфичној површини и подесивим физичко-хемијским својствима [1,2]. Модификовање електронских и стерних карактеристика имидазолатних линкера представља ефикасну стратегију за утицај на формирање мрежа и њену топологију. Овај рад испитује утицај врсте електрон- привлачних супституената на имидазолском линкеру на кристалохемију Co-ZIF-ова, са посебним освртом на улогу халогених супституената у усмеравању формирања мрежа при условима солвотермалне синтезе. Co-ZIF који садржи 4,5-дихлороимидазол кристалише у густој, непорозној **lcs** топологији, док преостале три структуре, засноване на 4,5-дибромо-, 4,5-дијодо- и 4-нитро-5-јодоимидазолу, кристалишу у порозној **rho** топологији (Слика 1).



Слика 1. Пројекције јединичних ћелија, дуж правца [100], Co-ZIF-ова са 4,5-дихлоро-, 4,5-дибромо-, 4,5-дијодо- и 4-нитро-5-јодоимидазолом, редом.

[1] A. Shahzad, F. Zulfiqar, M. A. Nadeem, *Coord.Chem.Rev*, **477** (2023) 214925.
[2] Y. Sun, N. Zhang, Y. Yue, J. Xiao, X. Huang, A. Ishaga, *Environ. Sci.: Nano*, **9** (2022) 4069–4092.

Захвалница: Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Евиденциони бројеви: 451-03-33/2026-03/200168 и 451-03-33/2026-03/200288).

CRYSTAL CHEMISTRY OF COBALT ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORKS BASED ON 4,5-DISUBSTITUTED IMIDAZOLE LINKERS

Andrej Milivojac [a] https://orcid.org/0009-0009-7123-6153,
Aleksandar Višnjevac [b] https://orcid.org/0000-0002-4382-6908,
Jasminka Popović [b] https://orcid.org/0000-0003-0800-2249,
Tamara Todorović [c] https://orcid.org/0000-0002-7740-3639

[a] *Innovative Centre of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;* [b] *Institute Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb, Croatia;*
[c] *University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia*
e-mail: andrejm@chem.bg.ac.rs

Cobalt-based zeolitic imidazolate frameworks (Co-ZIFs) represent an important subclass of metal-organic frameworks (MOFs) owing to their structural diversity, high surface areas, and tunable physicochemical properties [1,2]. Modifying the electronic and steric characteristics of imidazole linkers provides an effective strategy for influencing framework assembly and topology. In this work, the influence of electron-withdrawing substituents on imidazole linkers on the crystal chemistry of Co-ZIFs is investigated, with particular emphasis on the role of halogen substituents in directing framework assembly under solvothermal synthesis conditions. The Co-ZIF containing the 4,5-dichloroimidazole linker adopts the dense non-porous **lcs** topology, whereas the remaining three frameworks, based on 4,5-dibromo-, 4,5-diiodo-, and 4-nitro-5-iodoimidazole linkers, crystallize in the porous **rho** topology (Figure 1).

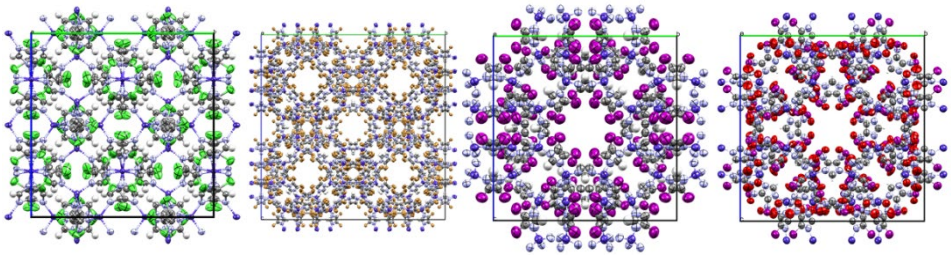


Figure 1. Projections of the unit cells, along the [100] direction, of Co-ZIFs with 4,5-dichloro-, 4,5-dibromo-, 4,5-diiodo-, and 4-nitro-5-iodoimidazole, respectively.

[1] A. Shahzad, F. Zulfiqar, M. A. Nadeem, *Coord.Chem.Rev*, **477** (2023) 214925.
[2] Y. Sun, N. Zhang, Y. Yue, J. Xiao, X. Huang, A. Ishaga, *Environ. Sci.: Nano*, **9** (2022) 4069–4092.

Acknowledgement: Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract numbers: 451-03-33/2026-03/200168 & 451-03-33/2026-03/200288).

КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ НОВИХ КОМПЛЕКСА Co(II) И Ni(II) СА СЕМИКАРБАЗОНОМ ПИРИДОКСАЛА

Никола Д. Радновић [a] https://orcid.org/0000-0002-5675-9003,
Марко В. Родић [a] https://orcid.org/0000-0002-4471-8001,
Светлана К. Белошевић [b] https://orcid.org/0000-0003-3555-054X,
Вукадин М. Леовац [a] https://orcid.org/0000-0003-3551-6034

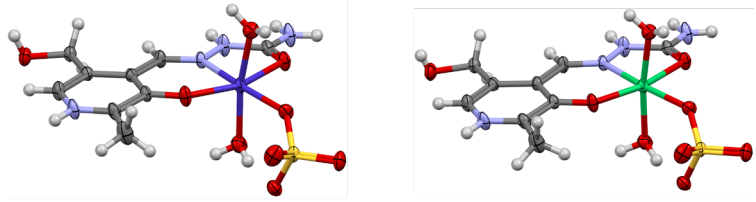
[a] *Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Нови Сад, Србија;* [b] *Универзитет у Приштини са привременим седиштем у Косовској Митровици, Факултет техничких наука, Косовска Митровица, Србија*
e-mail: nikolaradnovic@gmail.com

Комплекси $[Co(PLSC)(H_2O)_2SO_4]$ (**1**) и $[Ni(PLSC)(H_2O)_2SO_4]$ (**2**) добијени су реакцијом еквимоларних количина сулфатних соли одговарајућих метала и семикарбазона пиридоксала (PLSC) у воденом раствору. Комплекси су и у хемијском и у кристалографском смислу изоструктурни.

Лиганд се у оба комплекса координује као *ONO* тридентат, преко азометинског атома азота, атома кисеоника феноксидне и амидне групе. Централни атоми су хексакоординовани и налазе се у октаедарском окружењу које се остварује додатном координацијом атома кисеоника сулфатног јона у екваторијалном положају и два молекула воде у аксијалним положајима.

Кристалографски подаци за **1**: моноклинични кристални систем, просторна група $P2_1/n$, a = 9,1273(2), b = 9,3880(2), c = 17,8031(4) Å, β = 102,597(2)°, V = 1488.77(6) Å^3, Z = 4. Утачњавање 245 параметара је дало: R_1 = 0,030 (за 3152 рефлексија са $I \geq 2\sigma(I)$), wR_2 = 0,074, S = 1,06 (за све податке).

Кристалографски подаци за **2**: моноклинични кристални систем, просторна група $P2_1/n$, a = 9,0518(3), b = 9,3208(3), c = 17,7466(6) Å, β = 102,014(2)°, V = 1464,49(9) Å^3, Z = 4. Утачњавање 245 параметара је дало: R_1 = 0,032 (за 2928 рефлексија са $I \geq 2\sigma(I)$), wR_2 = 0,075, S = 1,09 (за све податке).



а) б)

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

Захвалница: Истраживања је подржало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Ев. бр. 451-03-33/2026-03/200125 и 451-03-34/2026-03/200125.

CRYSTAL STRUCTURES OF NEW Co(II) AND Ni(II) COMPLEXES WITH PYRIDOXAL SEMICARBAZONE

Nikola D. Radnović [a] https://orcid.org/0000-0002-5675-9003,
Marko V. Rodić [a] https://orcid.org/0000-0002-4471-8001,
Svetlana K. Belošević [b] https://orcid.org/0000-0003-3555-054X,
Vukadin M. Leovac [a] https://orcid.org/0000-0003-3551-6034

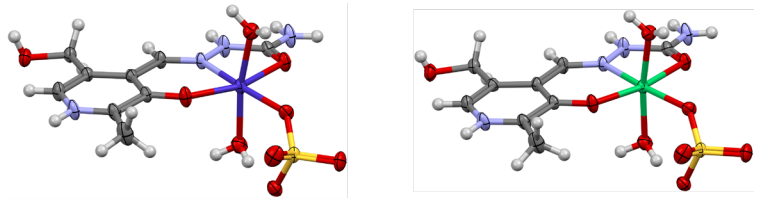
[a] *University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Novi Sad, Serbia;* [b] *University of Pristina in Kosovska Mitrovica, Faculty of Technical Sciences, Kosovska Mitrovica, Serbia*
e-mail: nikolaradnovic@gmail.com

Complexes $[Co(PLSC)(H_2O)_2SO_4]$ (**1**) and $[Ni(PLSC)(H_2O)_2SO_4]$ (**2**) were obtained by reaction of equimolar amounts of corresponding metal-sulfate salts and pyridoxal semicarbazone (PLSC) in water. Complexes are chemically and crystallographically isostructural.

The ligand coordinates in both complexes as an *ONO* tridentate ligand, through the azomethine nitrogen atom and the oxygen atoms of the phenoxide and amide groups. The central atoms are hexacoordinated and adopt an octahedral coordination environment, which is completed by additional coordination of an oxygen atom from the sulfate ion in the equatorial position and two water molecules in the axial positions.

Crystallographic data for **1**: monoclinic crystal system, $P2_1/n$, a = 9.1273(2), b = 9.3880(2), c = 17.8031(4) Å, β = 102.597(2)°, V = 1488.77(6) Å^3, Z = 4. Refinement of 245 parameters resulted in: R_1 = 0.030 (for 3152 reflections with $I \geq 2\sigma(I)$), wR_2 = 0.074, S = 1.06 (for all data).

Crystallographic data for **2**: monoclinic crystal system, $P2_1/n$, a = 9.0518(3), b = 9.3208(3), c = 17.7466(6) Å, β = 102.014(2)°, V = 1464.49(9) Å^3, Z = 4. Refinement of 245 parameters resulted in: R_1 = 0.032 (for 2928 reflections with $I \geq 2\sigma(I)$), wR_2 = 0.075, S = 1.09 (for all data).



a) b)

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

Acknowledgement: This research was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-33/2026-03/200125 & 451-03-34/2026-03/200125).

УТИЦАЈ ТОПОЛОГИЈЕ ПОЛИКАРБОКСИЛАТНИХ ЛИГАНАДА НА АРХИТЕКТУРУ Co(II)-КОМПЛЕКСА

Лидија Радовановић [a] https://orcid.org/0000-0002-7505-6290,
Душан Маленов [b] https://orcid.org/0000-0002-3060-3377,
Марко Родић [c] https://orcid.org/0000-0002-4471-8001,
Јелена Роган [d] https://orcid.org/0000-0002-4147-5251

[a] *Иновациони центар Технолошко-металуршког факултета у Београду д.о.о., Карнегијева 4, Београд, Србија;* [b] *Универзитет у Београду – Хемисјки факултет, Студентски трг 12–16, Београд, Србија;* [c] *Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Трг Доситеја Обрадовића 3, Нови Сад, Србија;*
[d] *Универзитет у Београду, Технолошко-металуршки факултет, Карнегијева 4, Београд, Србија*
e-mail: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

У циљу проучавања утицаја два структурно различита поликарбоксилатна лиганда, ipht (ipht^{2-} = изофталат-јон) и mell (mell^{6-} = мелитатат-јон), у Co(II)–bipy систему (bipy = 2,2′-бипиридин), анализирана су и упоређена два координациона полимера, $[Co(bipy)_2(ipht)_2]_n$ (**1**) и $\{[Co(bipy)(H_2O)_4]_2[Co(mell)(H_2O)_2]\cdot 10H_2O\}_n$ (**2**). Комплекс **1** има два кристалографски различита октаедарска Co-атома повезана различитим мостним ipht-лигандима (бидентатни-хелатни и бис-хелатни), при чему се формирају двоструки ланци стабилизовани π-π интеракцијама [1]. Структура комплекса **2** састоји се од дискретних $[Co(bipy)(H_2O)_4]^{2+}$ катјона, полимерних анјонских ланаца и некоординованих молекула воде [2]. Координација mell-лиганда је тетракис-монодентатна и омогућава формирање таласастих ланаца, док је супрамолекулско умрежавање постигнуто бројним водоничним везама и π-π интеракцијама. Упоредна структурна анализа комплекса **1** и **2** показује да геометрија и начин координације примењених поликарбоксилатних лиганада имају одлучујућу улогу у одређивању димензионалности, супрамолекулске организације и кристалног паковања насталих координационих полимера.
Одабрани кристалографски подаци и параметри утачњавања: **1**, $C_{18}H_{12}N_2O_4Co$, $P\bar{1}$, a = 9,3376(5), b = 11,2636(5), c = 16,7560(8) Å, α = 98,701(4), β = 94,538(4), γ = 112,325(4) °, V = 1593,38(13) Å^3, Z = 4, R = 0,0308 за 451 параметара и 4471 рефлексија; **2**, $C_{32}H_{56}N_4O_{32}Co_3$, $P\bar{1}$, a = 8,5218(17), b = 11,840(2), c = 12,201(2) Å, α = 83,01(3), β = 74,20(3), γ = 77,47(3) °, V = 1153,8(5) Å^3, Z = 1, R = 0,0406 за 398 параметара и 3685 рефлексија.

[1] J. Rogan, D. Poleti, Lj. Karanović, Z. Jagličić, *J. Mol. Struct.*, **985** (2011) 371–379.
[2] L. Radovanović, D. P. Malenov, M. V. Rodić, A. Kremenović, J. Rogan, *J. Mol. Struct.*, **1252** (2022) 132202.

Захвалница: Овај рад финансира Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (бројеви уговора 451-03-33/2026-03/200287, 451-03-34/2026-03/200135, 451-03-33/2026-03/200168 и 451-03-34/2026-03/200125).

INFLUENCE OF POLYCARBOXYLATE LIGAND TOPOLOGY ON THE ARCHITECTURE OF Co(II) COMPLEXES

Lidija Radovanović [a] https://orcid.org/0000-0002-7505-6290,
Dušan Malenov [b] https://orcid.org/0000-0002-3060-3377,
Marko Rodić [c] https://orcid.org/0000-0002-4471-8001,
Jelena Rogan [d] https://orcid.org/0000-0002-4147-5251

[a] *Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy in Belgrade Ltd. Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia;* [b] *University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Studentski trg 12–16, Belgrade, Serbia;* [c] *University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Trg Dositeja Obradovića 3, Novi Sad, Serbia;* [d] *University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia*
e-mail: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

To explore the influence of two structurally different polycarboxylate ligands, ipht ($ipht^{2-}$ = isophthalate ion) and mell ($mell^{6-}$ = mellitate ion), in the Co(II)–bipy system (bipy = 2,2′-bipyridine), two coordination polymers, formulated as $[Co(bipy)_2(ipht)_2]_n$ (**1**) and $\{[Co(bipy)(H_2O)_4]_2[Co(mell)(H_2O)_2]\cdot 10H_2O\}_n$ (**2**) were investigated and compared. Complex **1** contains two crystallographically distinct octahedral Co atoms connected by different bridging ipht ligands exhibiting bidentate-chelate and bis-chelate coordination modes, resulting in the formation of double chain architectures stabilized by π-π interactions [1]. In contrast, complex **2** consists of discrete $[Co(bipy)(H_2O)_4]^{2+}$ cations, polymeric anionic $\{[Co(mell)(H_2O)_2]^{4-}\}_n$ chains and lattice water molecules [2]. The mell ligand adopts a tetrakis-monodentate coordination mode, enabling the formation of wavy chains extending along the [100] direction. Supramolecular crosslinking in **2** is achieved through numerous hydrogen bonds and π-π interactions. Comparative structural analysis of **1** and **2** demonstrates that the geometry and coordination behavior of the employed polycarboxylate ligands play a decisive role in determining the dimensionality, supramolecular organization, and crystal packing of the resulting coordination polymers.
Selected crystallographic and refinement data: **1**, $C_{18}H_{12}CoN_2O_4$, $P\bar{1}$, a = 9.3376(5), b = 11.2636(5), c = 16.7560(8) Å, α = 98.701(4), β = 94.538(4), γ = 112.325(4) °, V = 1593.38(13) Å^3, Z = 4, R = 0.0308 for 451 parameters and 4471 reflections; **2**, $C_{32}H_{56}N_4O_{32}Co_3$, $P\bar{1}$, a = 8.5218(17), b = 11.840(2), c = 12.201(2) Å, α = 83.01(3), β = 74.20(3), γ = 77.47(3) °, V = 1153.8(5) Å^3, Z = 1, R = 0.0406 for 398 parameters and 3685 reflections.

[1] J. Rogan, D. Poleti, Lj. Karanović, Z. Jagličić, *J. Mol. Struct.*, **985** (2011) 371–379.
[2] L. Radovanović, D. P. Malenov, M. V. Rodić, A. Kremenović, J. Rogan, *J. Mol. Struct.*, **1252** (2022) 132202.

Acknowledgement: This work was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grant Nos. 451-03-33/2026-03/200287, 451-03-34/2026-03/200135, 451-03-33/2026-03/200168 and 451-03-34/2026-03/200125).

ЕЛЕКТРОН-ФОНОН ИНТЕРАКЦИЈА У КАГОМЕ РЕШЕТКИ: СИМЕТРИЈСКА АНАЛИЗА

Божидар Николић https://orcid.org/0000-0002-7241-3248

Универзитет у Београду, Физички факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија
e-mail: boza@ff.bg.ac.rs

Кагоме решетка представља вредну платформу за проучавање везе између фрустриране конфиурације и мноштва занимљивих физичких својстава [1]. У овом раду је дат преглед електрон-фонон спаривања у кагоме решеткама, за орбите високе симетрије [2]. Показано је постојање електронских стања у високо симетричним тачкама Брилуенове зоне која су потпуно декуплована од јонског подсистема [3]. Показано је, такође, да је недостатак интеракције у складу са дефинисаним изузецима за Јан-Телерову теорему [4]. Коначно, пронађени су сви кагоме системи који се састоје од специјаних орбита [5] са декуплованим електронским стањима. Анализиран је и дипериодични лимес просторних структура и сви дипериодични кагоме системи са декуплованим електронским стањима су пронађени.

[1] X. Wang, W. Tang, B. H. Cao, et al., *ACS Nano*, **19** (2025) 17323–17335.
[2] M. Damnjanović, I. Milošević, *Physics Reports,* **581** (2015) 1–43.
[3] B. Nikolić, I. Milošević, M. Damnjanović, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **126** (2021), 114468.
[4] I. Milošević, B. Nikolić, M. Damnjanović, *Phys. Status Solidi B*, **256** (2019) 1900242.
[5] M. I. Aroyo et al., *Acta Cryst. A*, **62** (2006) 115–128.

ELECTRON-PHONON COUPLING IN KAGOME LATTICE: SYMMETRY-BASED ANALYSIS

Božidar Nikolić https://orcid.org/0000-0002-7241-3248

University of Belgrade, Faculty of Physics, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia
e-mail: boza@ff.bg.ac.rs

The kagome lattice provides a valuable platform for studying the relationship between frustrated geometry and various intriguing physical properties [1]. In this work, an overview of electron-phonon coupling in kagome and kagome-based systems composed of highly symmetric orbits is presented [2]. The existence of electronic states at highly symmetric special points of the Brillouin zone that are completely decoupled from the ionic subsystem is demonstrated [3]. Furthermore, it is shown that the vanishing of the coupling terms is consistent with the exceptions to the Jahn-Teller theorem [4]. Finally, all kagome-based compounds composed of special orbits [5] with decoupled states are identified. The diperiodic limit of bulk kagome systems is also analysed, and all diperiodic systems with decoupled electronic states are listed.

[1] X. Wang, W. Tang, B. H. Cao, et al., *ACS Nano*, **19** (2025) 17323–17335.
[2] M. Damnjanović, I. Milošević, *Physics Reports,* **581** (2015) 1–43.
[3] B. Nikolić, I. Milošević, M. Damnjanović, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **126** (2021) 114468.
[4] I. Milošević, B. Nikolić, M. Damnjanović, *Phys. Status Solidi B*, **256** (2019) 1900242.
[5] M. I. Aroyo et al., *Acta Cryst. A*, **62** (2006) 115–128.

ОСНАЖИВАЊЕ СТУДЕНАТА ХЕМИЈЕ У ОТКРИВАЊУ НЕКОВАЛЕНТНИХ ИНТЕРАКЦИЈА КОРИШЋЕЊЕМ КЕМБРИЧКЕ БАЗЕ СТРУКТУРНИХ ПОДАТАКА – CSD4NCI РАДИОНИЦА

Слађана Ђорђевић [a] https://orcid.org/0000-0003-0194-3927,
Катарина А. Ћеранић [b] https://orcid.org/0009-0000-1688-5972,
Филип Сташевић [a] https://orcid.org/0000-0003-4790-6099,
Душан П. Маленов [c] https://orcid.org/0000-0002-3060-3377

[a] *Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, Крагујевац, Србија;* [b] *Иновациони центар Хемијског факултета, Београд, Србија;* [c] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Београд, Србија*
e-mail: malenov@chem.bg.ac.rs

Поред тога што представља највећи светски репозиторијум кристалних структура, Кембричка база структурних података (CSD) [1] је и јединствено богат извор експериментално добијених информација о нековалентним интеракцијама. У комбинацији са интегрисаним дигиталним алатима (CSD Portfolio), ови подаци омогућавају трансформацију разноврсних структурних запажања у опште принципе о нековалентним интеракцијама.

Са циљем унапређења разумевања и практичне примене нековалентних интеракција у настави хемије, развили смо скуп наставног материјала заснованог на CSD Portfolio. Овај едукативни пакет обухвата презентације, вођена вежбања, пратећи материјал и тестове, и осмишљен је да студенте упозна са разноврсношћу, значајем и анализом нековалентних интеракција кроз реалне структурне податке.

У оквиру CSD4NCI радионице студенти се обучавају за коришћење CSD дигиталних алата за хемоинформатичку анализу нековалентних интеракција, стичући практично искуство у рударењу структурних података и њиховој визуелизацији и интерпретацији. Циљ ове радионице је подизање свести о значају нековалентних интеракција, подстицање употребе CSD ресурса у образовању и истраживању, као и укључивање студената у савремену науку о структури.



[1] C. Groom, I. Bruno, M. Lightfoot, S. Ward, *Acta Cryst.*, **B72** (2016) 171–179.

Захвалница: Овај рад је подржан од стране Кембричког центра за кристалографске податке у оквиру иницијативе CCDC Engagement Grants.

EMPOWERING CHEMISTRY STUDENTS TO DISCOVER NONCOVALENT INTERACTIONS VIA THE CAMBRIDGE STRUCTURAL DATABASE – CSD4NCI WORKSHOP

Slađana Đorđević [a] https://orcid.org/0000-0003-0194-3927,
Katarina A. Ćeranić [b] https://orcid.org/0009-0000-1688-5972,
Filip Stašević [a] https://orcid.org/0000-0003-4790-6099,
Dušan P. Malenov [c] https://orcid.org/0000-0002-3060-3377

[a] *Faculty of Science, University of Kragujevac, Kragujevac, Serbia;* [b] *Innovative Centre of the Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia;* [c] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia*
e-mail: malenov@chem.bg.ac.rs

Beyond serving as the world's largest repository of crystal structures, the Cambridge Structural Database (CSD) [1] represents a uniquely rich source of experimentally derived information on noncovalent interactions. Combined with the integrated digital tools of the CSD Portfolio, these data enable the transformation of dispersed structural observations into generalizable principles governing noncovalent interactions.

To promote the understanding and practical application of noncovalent interactions in chemical education, we developed a comprehensive set of teaching resources based on the CSD Portfolio. The educational package includes lecture slides, guided exercises, handouts, and assessment materials designed to introduce students to the diversity, significance and analysis of noncovalent interactions through real structural data.

Within the CSD4NCI workshop, students are trained to use CSD digital tools for cheminformatics analysis of noncovalent interactions, gaining hands-on experience in structural data mining, visualization, and interpretation. The workshop aims to increase awareness of the importance of noncovalent interactions, encourage the use of CSD resources in education and research, and engage students in modern structural science.



[1] C. Groom, I. Bruno, M. Lightfoot, S. Ward, *Acta Cryst.*, **B72** (2016) 171–179.

Acknowledgement: This work was supported by the Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) within the framework of the CCDC Engagement Grants initiative.

КАКО СЕ ЗАВАРУЈУ СРЕБРНЕ НАНОЖИЦЕ: КОРЕЛАТИВНА 3Д ТОМОГРАФИЈА И 4Д-СТЕМ АНАЛИЗА СПОЈЕВА

Вук Радмиловић [a] https://orcid.org/0000-0002-1035-7068

[a] *Технолошко-металуршки факултет, Универзитет у Београду, Србија*
e-mail: vukradmilovic@tmf.bg.ac.rs

Сребрне наножице представљају једну од најперспективнијих алтернатива индијум-калај-оксиду за транспарентне електроде, захваљујући високој проводљивости, оптичкој транспарентности и могућности процесирања из течне фазе. Ипак, перформансе мрежа жица доминантно зависе од структуре и квалитета спојева између појединачних наножица.

У овом раду приказана је корелативна анализа формирања спојева код наножица сребра комбинацијом електронске томографије и четвородимензионалне скенирајуће трансмисионе електронске микроскопије (4Д-СТЕМ). Овај приступ омогућава директно повезивање тродимензионалне морфологије, кристалографске оријентације и расподеле деформација у завареним спојевима.

Мапирање деформација код петоструко двојникованих жица показује да је деформација решетке локализована између одређених двојникованих домена, где се компензује геометријско неслагање. Анализа оријентације потврђује да заварени спој наслеђује кристалну оријентацију једне наножице, што указује на хомоепитаксијални раст. На основу ових резултата предложен је механизам заваривања у четири корака: растварање површине, дифузија атома, формирање епитаксијалног контакта и латерални раст. Тродимензионалне реконструкције додатно потврђују асиметричну геометрију спојева, са преференцијалним контактом између области различите закривљености, у складу са термодинамичким покретачким силама.

Добијени резултати пружају увид у механизме формирања спојева на атомском нивоу и представљају основу за унапређење проводљивости и поузданости мрежа транспарентних електрода.

HOW SILVER NANOWIRES WELD: A CORRELATIVE 3D TOMOGRAPHY AND 4D-STEM STUDY OF JUNCTION FORMATION

Vuk Radmilović [a] https://orcid.org/0000-0002-1035-7068

[a] *Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Serbia*
e-mail: vukradmilovic@tmf.bg.ac.rs

Silver nanowires (AgNWs) are a leading alternative to indium tin oxide (ITO) for transparent electrodes due to their high electrical conductivity, optical transparency, and compatibility with solution processing. However, the performance of AgNW networks is primarily governed by the structure and quality of junctions between individual nanowires.

Here, we present a correlative study of junction formation in AgNWs by combining electron tomography and four-dimensional scanning transmission electron microscopy (4D-STEM). This approach enables direct correlation between three-dimensional morphology, crystallographic orientation, and strain distribution within welded junctions. Strain mapping of five-fold twinned AgNWs reveals that lattice distortion is localized between specific twin domains, where geometrical mismatch is accommodated. Orientation analysis shows that the welded region inherits the crystallographic orientation of one nanowire, indicating homoepitaxial growth. Based on these findings, a four-stage welding mechanism is proposed: surface dissolution, atomic diffusion, epitaxial neck formation, and lateral growth. Three-dimensional reconstructions further confirm asymmetric junction geometries, characterized by preferential contact between regions of different curvature, consistent with thermodynamic driving forces.

These results provide atomic-scale insight into junction formation in AgNW networks and establish a framework for improving the electrical performance and reliability of transparent electrodes.

ПОСТЕРСКА САОПШТЕЊА

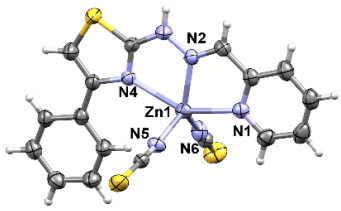
POSTER PRESENTATIONS

МОНОНУКЛЕАРНИ КОМПЛЕКС Zn(II) СА ХИДРАЗОНИЛ-ТИАЗОЛОМ: ТРАНСФОРМАЦИЈА У 1Д КООРДИНАЦИОНИ ПОЛИМЕР, СТРУКТУРНА АНАЛИЗА И ЦИТОТОКСИЧНА АКТИВНОСТ

Јована Арашков [a] https://orcid.org/0000-0001-5352-7752,
Александар Вишњевац [b] https://orcid.org/0000-0002-4382-6908,
Татјана Срдић-Рајић [c] https://orcid.org/0000-0001-9840-6970,
Тамара Тодоровић [a] https://orcid.org/0000-0002-7740-3639,
Ненад Филиповић [d] https://orcid.org/0000-0003-2982-5324

[a] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија;* [b] *Институт Руђер Бошковић, Бијеничка цеста 54, Загреб, Хрватска;*
[c] *Институт за онкологију и радиологију Србије, Пастерова 14, Београд, Србија;*
[d] *Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Немањина 6, Београд, Србија*
e-mail: araskovj@chem.bg.ac.rs

Координациона једињења Zn(II) са хидразонил-тиазолима показују велику структурну разноликост и представљају обећавајуће кандидате за различите примене, укључујући терапеутске агенсе. Мононуклеарни комплекс Zn(II), [Zn(HLS^1)(NCS)$_2$] (**1-NCSm**), са 2-(2-(пиридин-2-илметилен)хидразонил)-4-(4-фенил)-1,3-тиазолом (HLS^1), синтетисан је и потпуно окарактерисан. Анализом кристалне структуре **1-NCSm** је потврђено да је лиганд *NNN*-тридентатно координован, док два изотиоцијанатна анјона допуњују координациону сферу (**Слика 1**). Прекристализацијом мононуклеарног комплекса **1-NCSm** из врелог ДМФ раствора долази до његове транфсормације у 1Д координациони полимер [Zn$_2$(LS^1)$_2$(NCS)$_2$]$_\infty$ (**1-NCSp**) (**Слика 2**). Код **1-NCSp** је утврђено да постоје два кристалографски независна центра Zn(II), са тетраедарском и октаедарском геометријом, који су повезани *NNNN*-тетрадентатно координованим лигандом (**Слика 2**). Хидразонил-тиазолски лиганд показује неуобичајен тридентатно-мосни начин координације. Једињење **1-NCSm** показује веома изражену цитотоксичну активност према две ћелијске линије карцинома панкреаса, као и умерену активност према здравој ћелијској линији.



Слика 1. ORTEP приказ молекулске структуре **1-NCSm**. Термални елипсоиди су приказани са 50 % вероватноће.
Fig. 1. ORTEP drawing of molecular structure of **1-NCSm**. Thermal elipsoids are shown at 50 % of probability level.

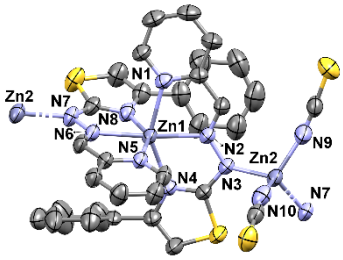
Захвалница: Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Евиденциони бројеви: 451-03-33/2026-03/200168 и 451-03-34/2026-03/200116).

MONONUCLEAR Zn(II) HYDRAZONYL-THIAZOLE COMPLEX: TRANSFORMATION INTO A 1D COORDINATION POLYMER, STRUCTURE ANALYSIS AND CYTOTOXICITY

Jovana Araškov[a] https://orcid.org/0000-0001-5352-7752,
Aleksandar Višnjevac [b] https://orcid.org/0000-0002-4382-6908
Tatjana Srdić-Rajić [c] https://orcid.org/0000-0001-9840-6970
Tamara Todorović [a] https://orcid.org/0000-0002-7740-3639
Nenad Filipović [d] https://orcid.org/0000-0003-2982-5324

[a] *Universtity of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;* [b] *Institute Ruđer Bošković, Bjenička cesta 54, Zagreb, Croatia;* [c] *Institute for Oncology and Radiology of Sebria, Pasterova 14, Belgrade, Serbia;* [d] *Universtity of Belgrade – Faculty of Agriculture, Nemanjina 6, Belgrade, Serbia*
e-mail: araskovj@chem.bg.ac.rs

Zn(II) coordination compounds with hydrazonyl-thiazole ligands exhibit pronounced structural diversity and represent promising candidates for various applications, including therapeutic agents. A mononuclear Zn(II) complex, $[Zn(HLS^1)(NCS)_2]$ (**1-NCSm**), with 2-(2-(pyridine-2-ylmethylene)hydrazinyl)-4-(4-phenyl)-1,3-thiazole (HLS^1), was synthesized and fully characterized. Analysis of the crystal structure of **1-NCSm** confirmed that the ligand is coordinated in an *NNN*-tridentate fashion, while two isothiocyanate anions complete the coordination sphere (**Fig. 1**). Recrystallization of the mononuclear complex **1-NCSm** from hot DMF solution leads to its transformation into a 1D coordination polymer $[Zn_2(LS^1)_2(NCS)_2]_\infty$ (**1-NCSp**) (**Fig. 2**). In **1-NCSp**, two crystallographically independent Zn(II) centers were identified, exhibiting tetrahedral and octahedral geometries, respectively. Metal centers are interconnected by an *NNNN*-tetradentate coordinated ligand (**Fig. 2**). The hydrazonyl-thiazole HLS^1 ligand displays an unusual tridentate-bridging coordination mode. **1-NCSm** shows promising antiproliferative activity against two pancreatic cancer cell lines and moderate activity against the non-malignat cell line.



Слика 2. ORTEP приказ асиметричне јединице **1-NCSp**. Термални елипсоиди су приказани са 50 % вероватноће.
Fig. 2. ORTEP drawing of the asymmetric unit of **1-NCSp**. Thermal elipsoids are shown at 50 % of probability level.

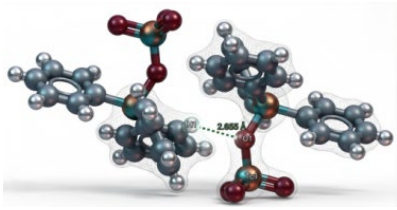
Acknowledgement: Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract numbers: 451-03-33/2026-03/200168 & 451-03-34/2026-03/200116).

СЛАБЕ C–H···O ИНТЕРАКЦИЈЕ КОЈЕ УКЉУЧУЈУ ПЕРТЕХНЕЦИЈУМСКУ КИСЕЛИНУ: УВИДИ ИЗ КРИСТАЛНИХ СТРУКТУРА И КВАНТНОХЕМИЈСКИХ ПРОРАЧУНА

Миљан Биговић [a] https://orcid.org/0000-0003-2300-3063,
Душан Вељковић [b] https://orcid.org/0000-0002-1382-8785,
Јелена Петровић [c] https://orcid.org/0000-0002-7168-8848,
Ивана Вељковић [d] https://orcid.org/0000-0003-0584-4053

[a] *Природно-математички факултет, Универзитет Црне Горе, Подгорица, Црна Гора;* [b] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Београд, Србија;* [c] *Центар за нуклеарну медицину са ПЕТ-ом, Универзитетски клинички центар Србије, Београд, Србија; Медицински факултет, Универзитет у Београду, Београд, Србија;* [d] *Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију – Институт од националног значаја за Републику Србију, Београд, Србија*
e-mail: miljan@ucg.ac.me

Слабе C–H···O водоничне везе играју важну улогу у стабилизацији супрамолекулских асемблажа и биомолекулских система. У овом раду су, коришћењем квантнохемијских прорачуна и анализе кристалних структура, испитане C–H···O интеракције између пертехнецијумске киселине (HTcO4) и ароматичних аминокиселина (фенилаланин, тирозин и триптофан). Енергије интеракције су израчунате за серију модел-система на MP2/def2-TZVP нивоу. Најјача интеракција добијена је за систем HTcO–триптофан -2,28 kcal/ mol, затим за фенилаланин -2,27 kcal/mol, и тирозин -2,06 kcal/mol.



C–H···O–Tc интеракција у фрагменту кристалне структуре KACWAO.

Кембричка база структурних података (CSD) је претражена у циљу проналажења кристалних структура које садрже X–H···O–Tc контакте са тетракоординованим врстама технецијума. Неколико експериментално одређених кристалних структура показало је геометријске параметре карактеристичне за C–H···O интеракције. Ови налази подржавају постојање таквих интеракција у системима у чврстом стању и истичу њихов могући допринос стабилизацији супрамолекулских архитектура и биомолекулских комплекса који садрже технецијум.

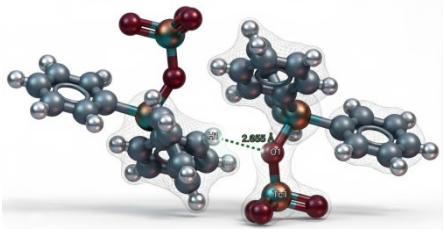
Захвалница: Ово истраживање је финансијски подржало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (уговор бр. 451-03-33/2026-03/200026 и 451-03-33/2026-03/200168).

WEAK C–H···O INTERACTIONS INVOLVING PERTECHNETIC ACID: INSIGHTS FROM CRYSTAL STRUCTURES AND QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS

Miljan Bigović [a] https://orcid.org/0000-0003-2300-3063,
Dušan Veljković [b] https://orcid.org/0000-0002-1382-8785,
Jelena Petrović [c] https://orcid.org/0000-0002-7168-8848,
Ivana Veljković [d] https://orcid.org/0000-0003-0584-4053

[a] *Faculty of Natural Sciences and Mathematics, University of Montenegro, Podgorica, Montenegro;* [b] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia;* [c] *Center for Nuclear Medicine with PET, University Clinical Center of Serbia, Belgrade, Serbia; Faculty of Medicine, University of Belgrade, Belgrade, Serbia;* [d] *University of Belgrade – Institute for Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, Belgrade, Serbia*
e-mail: miljan@ucg.ac.me

Weak C–H···O hydrogen bonds play an important role in the stabilization of supramolecular assemblies and biomolecular systems. In this work, C–H···O interactions between pertechnetic acid (HTcO4) and aromatic amino acids (phenylalanine, tyrosine and tryptophan) were investigated using quantum-chemical calculations and crystal structure analysis. Interaction energies were calculated for a series of model systems at the MP2/def2-TZVP level of theory. The strongest interaction was obtained for the HTcO4–tryptophan system -2.28 kcal/mol, followed by phenylalanine -2.27 kcal/mol and tyrosine -2.06 kcal/mol.



C–H···O–Tc interaction in a fragment of the KACWAO crystal structure.

The Cambridge Structural Database (CSD) was searched for crystal structures containing X–H···O–Tc contacts involving tetracoordinate technetium species. Several experimentally determined crystal structures exhibited geometrical parameters characteristic for C–H···O interactions. These findings support the existence of such interactions in solid-state systems and highlight their possible contribution to the stabilization of technetium-containing supramolecular architectures and biomolecular complexes.

Acknowledgement: This research has been financially supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract No. 451-03-33/2026-03/200026 and 451-03-33/2026-03/200168).

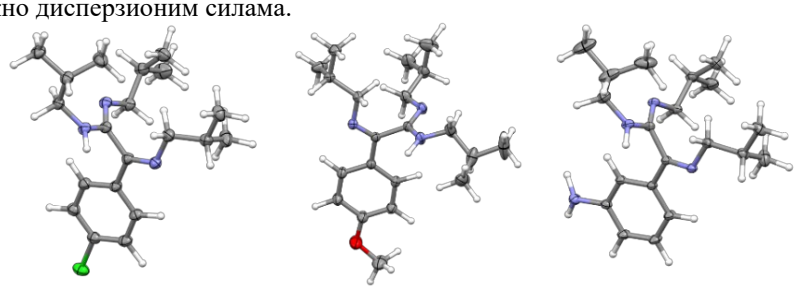
α-ИМИНОАМИДИНИ: УВИД У КРИСТАЛНО ПАКОВАЊЕ НА ОСНОВУ УТАЧЊАВАЊА МОДЕЛОМ ХИРШФЕЛДОВОГ АТОМА И ЕНЕРГИЈА МЕЂУМОЛЕКУЛСКИХ ИНТЕРАКЦИЈА

Милица Г. Богдановић [a] https://orcid.org/0000-0001-7122-6929,
Милан С. Нешић [b] https://orcid.org/0000-0002-5683-9353,
Matic Lozinšek [c] https://orcid.org/ 0000-0002-1864-4248,
Нико С. Радуловић [b] https://orcid.org/0000-0003-1342-7567,
Марко В. Родић [a] https://orcid.org/0000-0002-4471-8001.

[a] *Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Нови Сад, Србија;* [b] *Универзитет у Нишу, Природно-математички факултет, Ниш, Србија;* [c] *Институт Јожеф Стефан, Љубљана, Словенија*
e-mail: milica.bogdanovic@dh.uns.ac.rs

Кристалне структуре три одабрана деривата α-иминоамидина, који се разликују по супституенту на фенилном прстену (слика 1), анализиране су са геометријског и енергијског аспекта ради објашњења кристалног паковања и улоге међумолекулских интеракција у њиховој стабилизацији.

Структурни модели сва три једињења утачњавани су моделом Хиршфелдовог атома [1] ради прецизинијег описа електронске густине и поузданијег одређивања положаја неводоничних и водоничних атома, као и параметара хемијских веза у молекулу, у односу на стандардни метод утачњавања. Енергије међумолекулских интеракција су показале да је у све три кристалне структуре основна градивна јединица центросиметрични димер повезан двема N–H···N водоничним везама ($E_{int} \approx -27$ kcal mol^{-1}). Ове димерне градивне јединице су даље повезане слабијим међумолекулским интеракцијама, при чему граде слојевит распоред стабилизован претежно дисперзионим силама.



Слика 1. Молекулске структуре одабраних деривата α-иминоамидина

[1] S. C. Capelli, H. B. Bürgi, B. Dittrich, S. Grabowsky, D. Jayatilaka, *IUCrJ*, **1** (2014) 361–379.

Захвалница: Истраживања је подржало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Ев. бр. 451-03-33/2026-03/200125, 451-03-34/2026-03/200125 и 451-03-34/2026-03/200124) 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).

A STUDY OF α-IMINOAMIDINES: INSIGHTS INTO CRYSTAL PACKING BASED ON HIRSHFELD ATOM REFINEMENT AND INTERMOLECULAR INTERACTION ENERGIES

Milica G. Bogdanović [a] https://orcid.org/0000-0001-7122-6929,
Milan S. Nešić [b] https://orcid.org/0000-0002-5683-9353,
M. Lozinšek [c] https://orcid.org/ 0000-0002-1864-4248,
Niko S. Radulović [b] https://orcid.org/0000-0003-1342-7567,
Marko V. Rodić [a] https://orcid.org/0000-0002-4471-8001.

[a] *University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Novi Sad, Serbia;* [b] *University of Niš, Faculty of Sciences and Mathematics, Niš, Serbia;* [c] *Jožef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia*
e-mail: milica.bogdanovic@dh.uns.ac.rs

Crystal structures of three selected α-iminoamidine derivatives, which differ in the substituent on the phenyl ring (Figure 1), were analyzed from geometric and energetic perspectives in order to determine crystal packing and show the role of intermolecular interactions in their stabilization.

Structural models of all three compounds were refined using the Hirshfeld Atom Refinement (HAR) [1], enabling a more accurate description of the electron density and a more reliable determination of both non-hydrogen and hydrogen atomic positions, as well as geometrical parameters, compared to the standard refinement model.

Intermolecular interaction energy calculations revealed that the primary structural motif in all three crystal structures is a centrosymmetric dimer formed by two N–H···N hydrogen bonds ($E_{int} \approx -27$ kcal mol^{-1}). This dimeric building unit is further connected through weaker intermolecular interactions, forming a layered arrangement stabilized predominantly by dispersion forces.

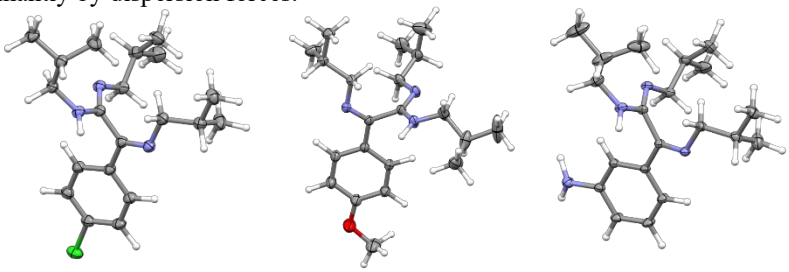


Figure 1. Molecular structures of selected α-iminoamidine derivatives

[1] S. C. Capelli, H. B. Bürgi, B. Dittrich, S. Grabowsky, D. Jayatilaka, *IUCrJ*, **1** (2014) 361–379.

Acknowledgement: This research was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-33/2026-03/200125, 451-03-34/2026-03/200125 & 451-03-34/2026-03/200124) 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).

МЕЂУСОБНИ УТИЦАЈ КООРДИНАЦИОНЕ ФЛЕКСИБИЛНОСТИ Cu(II) И КООРДИНАЦИЈЕ РАСТВАРАЧА У СЛОЈЕВИТОМ ZIF-У СА 4,5-ДИХЛОРОИМИДАЗОЛОМ

Андреј Миливојац [a] https://orcid.org/0009-0009-7123-6153,
Александар Вишњевац [b] https://orcid.org/0000-0002-4382-6908,
Јасминка Поповић [b] https://orcid.org/0000-0003-0800-2249,
Тамара Тодоровић [c] https://orcid.org/0000-0002-7740-3639

[a] *Иновациони центар Хемијског факултета, Студентски трг 12-16, Београд, Србија;* [b] *Институт Руђер Бошковић, Бијеничка цеста 54, Загреб, Хрватска;*
[c] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија*
e-mail: visnevac@irb.hr

Координациони полимери бакра са имидазолатним линкерима привлаче значајну пажњу због велике структурне разноврсности која произлази из координационе флексибилности Cu(II) јона [1]. Слојевити зеолитни имидазолатни оквири (L-ZIF), као посебна поткласа ових материјала, одликују се повезаношћу метал-имидазолатних јединица у две димензије, што доводи до формирања слојевитих архитектура и различитих топологија мреже [2]. У овом раду синтетисан је нови Cu(II) L-ZIF са 4,5-дихлороимидазолом (4,5-dClIm) као линкером, под солвотермалним условима. Кристална структура показује два кристалографски независна Cu(II) центра у асиметричној јединици. Један Cu(II) јон се налази у тетраедарском окружењу и координован је за четири 4,5-dClIm линкера, док је други Cu(II) центар у квадратно-пирамидалном окружењу формираном од стране четири 4,5-dClIm линкера у базалној равни и једног координованог молекула ДМФ-а у апикалном положају (**Слика 1**). Истовремено присуство тетраедарског и квадратно-пирамидалног координационог окружења око Cu(II) центара усмерава формирање слојевите дводимензионалне мреже. Резултати овог рада наглашавају кључну улогу координационе флексибилности Cu(II) јона, заједно са ефектом координације растварача, у усмеравању самоорганизације, топологије и димензионалности структура заснованих на халоген-супституисаним имидазолним линкерима.

[1] N. Masciocchi, S. Bruni, E. Cariati, F. Cariati, S. Galli, A. Sironi, *Inorg. Chem*., **40** (2001) 5897–5905.
[2] Z. Rong, Z. Chen, F. Luong, et al., *Nat. Synth.*, **5** (2026) 409–419.

Захвалница: Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Евиденциони бројеви: 451-03-33/2026-03/200168 и 451-03-33/2026-03/200288).

INTERPLAY OF Cu(II) COORDINATION FLEXIBILITY AND SOLVENT COORDINATION IN A LAYERED ZIF WITH 4,5-DICHLOROIMIDAZE

Andrej Milivojac [a] https://orcid.org/0009-0009-7123-6153,
Aleksandar Višnjevac [b] https://orcid.org/0000-0002-4382-6908,
Jasminka Popović [b] https://orcid.org/0000-0003-0800-2249,
Tamara Todorović [c] https://orcid.org/0000-0002-7740-3639

[a] *Innovative Centre of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;* [b] *Institute Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb, Croatia;* [c]*University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia*
e-mail: visnevac@irb.hr

Copper-imidazolate coordination polymers are of significant interest due to the rich structural diversity arising from the flexible coordination behavior of Cu(II) centers [1]. Layered zeolitic imidazolate frameworks (L-ZIFs), a distinct subclass of these materials, exibit two-dimensional metal-imidazolate connectivity that give rise to sheet-like architectures and diverse framework topologies [2]. In this work, a new L-ZIF with 4,5-dichloroimidazolate (4,5-dClIm) linker was synthesized under solvothermal conditions. The crystal structure reveals two crystallographically independent Cu(II) centers in the asymmetric unit. One Cu(II) ion adopts a tetrahedral coordination geometry, coordinated by four 4,5-dClIm linkers, while the second Cu(II) center exhibits a square-pyramidal environment, formed by four 4,5-dClIm linkers in the basal plane and one coordinated DMF molecule occupying the apical position (**Fig. 1**). The coexistence of tetrahedral and square-pyramidal Cu(II) coordination environments directs the formation of a layered two-dimensional framework. These findings highlight the crucial role of Cu(II) coordination flexibility, together with solvent coordination effects, in governing the assembly, topology, and dimensionality of halogen-substituted imidazolate-based frameworks.

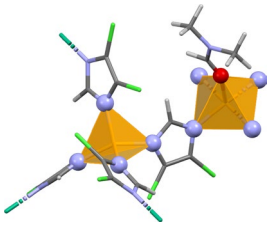


Figure 1. Monomeric unit of $[Cu_2(4,5\text{-dClIm})_4DMF]_\infty$

Слика 1. Мономерна јединица $[Cu_2(4,5\text{-dClIm})_4DMF]_\infty$

[1] N. Masciocchi, S. Bruni, E. Cariati, F. Cariati, S. Galli, A. Sironi, *Inorg. Chem.*, **40** (2001) 5897–5905.
[2] Z. Rong, Z. Chen, F. Luong, et al., *Nat. Synth.*, **5** (2026) 409–419.

Acknowledgement: Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract numbers: 451-03-33/2026-03/200168 & 451-03-33/2026-03/200288).

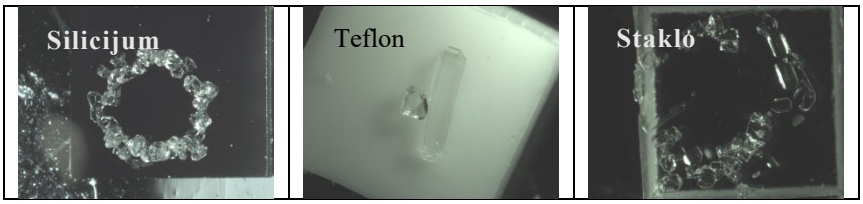
FORMIRANJE KRISTALNIH STRUKTURA PRI ISPARAVANJU KAPLJICA *KDP* RASTVORA – UTICAJ PODLOGE

Branislava Vučetić https://orcid.org/0000-0001-9621-0376,
Andrijana Žekić https://orcid.org/0000-0001-7720-5846,
Milica Milojević https://orcid.org/0000-0001-8535-4788,
Biljana Maksimović https://orcid.org/0000-0001-6998-9425

Univerzitet u Beogradu, Fizički fakultet, Studentski trg 12-16, 11001 Beograd, Srbija
e-mail: b_misailovic@ff.bg.ac.rs

U ovom radu ispitivan je uticaj podloge na formiranje kristalnih struktura pri isparavanju kapljica *KDP* rastvora zasićenog na 30 °C. Eksperimenti su izvedeni na različitim podlogama: staklu, teflonu i silicijumu, pri temperaturi od 30 °C pri relativnoj vlažnosti vazduha 75% [1]. Nakon potpunog isparavanja analizirana je morfologija nastalih kristalnih depozita i izvršena je njihova kvalitativna klasifikacija prema dominantnom obliku struktura.

Rezultati pokazuju da vrsta podloge značajno utiče na način kristalizacije i raspodelu kristala unutar osušenog uzorka [1-3]. Na silicijumskoj podlozi dominantno se formiraju prstenaste strukture, što ukazuje na izražen transport rastvora ka kontaktnoj liniji tokom isparavanja [1,2]. Teflonska podloga pokazuje povećanu tendenciju ka formiranju konglomerata velikog broja sitnih kristala, dok se na staklu uočava najveća morfološka raznovrsnost i prisustvo prelaznih oblika između definisanih kategorija [1,3]. Monokristali su se češće fomirali na staklenoj i teflonskoj podlozi nego na silicijumskoj. Na slici 1 prikazane su neke od struktura formiranih na ispitivanim podlogama.



Slika 1. Primeri kristalnih struktura formiranih isparavanjem kapljica *KDP* rastvora.

Dobijeni rezultati ukazuju da osobine podloge imaju značajnu ulogu u procesu isparavanja i kristalizacije *KDP* rastvora, te mogu uticati na morfologiju i prostornu raspodelu nastalih kristalnih struktura.

[1] X. Zhong, J. Ren, F. Duan, *Physics of Fluids*, **121(33)** (2021) 7924–7933.
[2] X. Yang, Z. Jiang, P. Lyu, Z. Ding, X. Man *Communications in Theoretical Physics*, **73(4)** (2021) 047601.
[3] S. Tarafdar, Y. Y. Tarasevich, M. Dutta Choudhury, T. Dutta, *Advances in Condensed Matter Physics*, **2018** (2018) 5214924.

FORMATION OF CRYSTAL STRUCTURES IN EVAPORATING *KDP* SESSILE DROPLETS – SUBSTRATE EFFECTS

Branislava Vučetić https://orcid.org/0000-0001-9621-0376,
Andrijana Žekić https://orcid.org/0000-0001-7720-5846,
Milica Milojević https://orcid.org/0000-0001-8535-4788,
Biljana Maksimović https://orcid.org/0000-0001-6998-9425

University of Belgrade, Faculty of Physics, Studentski trg 12-16, 11001 Beograd, Serbia
e-mail: b_misailovic@ff.bg.ac.rs

In this study, the influence of the substrate on the formation of crystal structures during the evaporation of sessile droplets of a *KDP* solution saturated at 30 °C was investigated. The experiments were carried out on different substrates: glass, Teflon, and silicon, at a temperature of 30 °C and a relative air humidity of 75% [1]. After evaporation, the morphology of the obtained crystal deposits was analyzed, and a qualitative classification was performed according to the dominant structural forms.

The results show that the type of substrate significantly affects the crystallization process and the distribution of crystals within the dried sample [1-3]. On the silicon substrate, ring-shaped structures predominantly form, indicating pronounced solution transport toward the contact line during evaporation [1,2]. The Teflon substrate shows an increased tendency toward the formation of conglomerates composed of a large number of small crystals, while glass exhibits the greatest morphological diversity and the presence of transitional forms between the defined categories [1,3]. Single crystals formed more frequently on glass and Teflon substrates than on the silicon substrate. Figure 1 shows some of the structures formed on the investigated substrates.

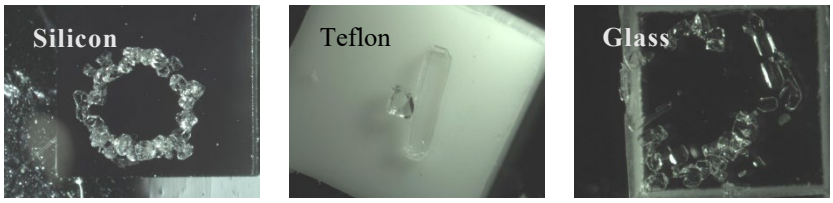


Figure 1. Examples of structures formed by the evaporation of *KDP* sessile droplets.

The obtained results indicate that the properties of the substrate play a significant role in the evaporation and crystallization process of the *KDP* solution and may influence the morphology and spatial distribution of the resulting crystal structures.

[1] X. Zhong, J. Ren, F. Duan, *Physics of Fluids*, **121(33)** (2021) 7924–7933.
[2] X. Yang, Z. Jiang, P. Lyu, Z. Ding, X. Man *Communications in Theoretical Physics*, **73(4)** (2021) 047601.
[3] S. Tarafdar, Y. Y. Tarasevich, M. Dutta Choudhury, T. Dutta, *Advances in Condensed Matter Physics*, **2018** (2018) 5214924.

УТИЦАЈ ПРИСУСТВА ДИХАЛОАМИНСКИХ СУПСТИТУЕНАТА НА ВИСОКОЕНЕРГЕТСКА СВОЈСТВА НИТРОАРОМАТИЧНИХ МОЛЕКУЛА

Александра Б. Ђуновић [a] https://orcid.org/0000-0002-4690-0106,
Христина Господиновић [b] https://orcid.org/0009-0002-2192-9356,
Душан Ж. Вељковић [c] https://orcid.org/0000-0002-1382-8785

[a] *Иновациони центар Хемијског факултета у Београду д.о.о., Студентски трг 12 – 16, 11000 Београд, Србија;* [b] *Институт за јавно здравље Србије „Др Милан Јовановић Батут“, Др Суботића старијег 5, 11000 Београд, Србија*
[c] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12 – 16, 11000 Београд, Србија*
e-mail: adjunovic@chem.bg.ac.rs

Присуство -NO_2 супституената у високоенергетским молекулима (HEM) значајно утиче на њихову детонабилност, а као један од разлога за то се наводи електрон-привлачни ефекат ове групе [1]. Индикатори детонабилности молекула који се често користе у истраживањима јесу енергије дисоцијација веза (BDE) и електростатички потенцијали изнад централне регије молекулске површи (MEP) [2].

Урађена је претрага Кембричке базе структурних података (CSD) ради пронажења кристалних структура нитроароматичних молекула који у свом саставу имају дихалоаминске супституенте. Као резултат добијене су две кристалне структуре (FANTBZ и FADNAN), те су за испитивања детонабилности молекула коришћене квантнохемијске методе. Рачунати су BDE и MEP за ароматичне молекуле са различитим бројем -NO_2 и -NX_2 супституената. Прорачуни су се заснивали на теорији функционала густине (DFT) и рађени су на PBE/6-311G** нивоу уз додатак GD3BJ дисперзије.

Анализом добијених резултата примећено је да долази до смањења потенцијала изнад централне регије молекула како се халогени у оквиру -NX_2 супституента мењају у низу: F, Cl, Br, I. Вредност потенцијала изнад молекула који има један -NF_2 и два -NO_2 супституента износи 22,36 kcal/mol. Када се -NF_2 замене -NI_2 супституентима, вредност потенцијала опада (15,17 kcal/mol) указујући на смањење осетљивости молекула. Примећен је и тренд пада вредности потенцијала са смањењем броја -NO_2, односно -NX_2 супституената (у молекулима који не садрже -NO_2 супституенте). Израчунате BDE вредности су у складу са резултатима добијеним анализом MEP.

[1] J. S. Murray, P. Lane, P. Politzer, *Mol. Phys.*, **93** (1998) 187–194.
[2] I. S. Veljković, A. B. Đunović, D. Ž. Veljković, *J Phys Org Chem*, **37** (2024) e4649.

Захвалница: Истраживање је спроведено уз подршку Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије, Евиденциони број: 451-03-33/2026-03/200288 и 451-03-33/2026-03/200168.

INFLUENCE OF THE PRESENCE OF DIHALOAMINE SUBSTITUENTS ON THE HIGH-ENERGY PROPERTIES OF NITROAROMATIC MOLECULES

Aleksandra B. Đunović [a] https://orcid.org/ 0000-0002-4690-0106,
Hristina Gospodinović [b] https://orcid.org/0009-0002-2192-9356,
Dušan Ž. Veljković [c] https://orcid.org/ 0000-0002-1382-8785

[a] *Innovative Centre of the Faculty of Chemistry in Belgrade, Ltd, Studentski trg 12 – 16, 11000 Belgrade, Serbia;* [b] *Institute of Public Health of Serbia "Dr. Milan Jovanović Batut", Dr Subotića starijeg 5, 11000 Belgrade, Serbia;* [c] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12 – 16, 11000, Belgrade, Serbia*
e-mail: adjunovic@chem.bg.ac.rs

The presence of $-NO_2$ substituents in high energetic molecules (HEMs) significantly affects their sensitivity towards detonation and one of the reasons is the electron-withdrawing effect of this group [1]. Indicators of the sensitivity of molecules towards detonation that are often used in studies are bond dissociation energies (BDE) and electrostatic potentials above the central region of the molecular surface (MEP) [2].

The Cambridge Structural Database (CSD) was searched for crystal structures of nitroaromatic molecules that contain dihaloamine substituents. As a result, two crystal structures were obtained (FANTBZ and FADNAN) and quantum chemical methods were used for the studies of the sensitivity of molecules towards detonation. BDE and MEP were calculated for aromatic molecules with different numbers of $-NO_2$ and $-NX_2$ substituents. The calculations were based on density functional theory (DFT) and performed at the PBE/6-311G** level with the addition of GD3BJ dispersion.

The analysis of the obtained results showed that the potentials above the central regions of the molecules decrease as the halogens within the $-NX_2$ substituents change in the following order: F, Cl, Br, I. The value of the potential above the molecule with one $-NF_2$ and two $-NO_2$ substituents is 22.36 kcal/mol. When $-NF_2$ substituents are replaced by $-NI_2$, the value of the potential decreases (15.17 kcal/mol), indicating a decrease in the sensitivity of the molecule. A trend of decreasing potential values with a decrease in the number of $-NO_2$ or $-NX_2$ substituents (in molecules that do not contain $-NO_2$ substituents) was also observed. The calculated BDE values are in agreement with the results obtained by MEP analysis.

[1] J. S. Murray, P. Lane, P. Politzer, *Mol. Phys.*, **93** (1998) 187–194.
[2] I. S. Veljković, A. B. Đunović, D. Ž. Veljković, *J Phys Org Chem*, **37** (2024) e4649.

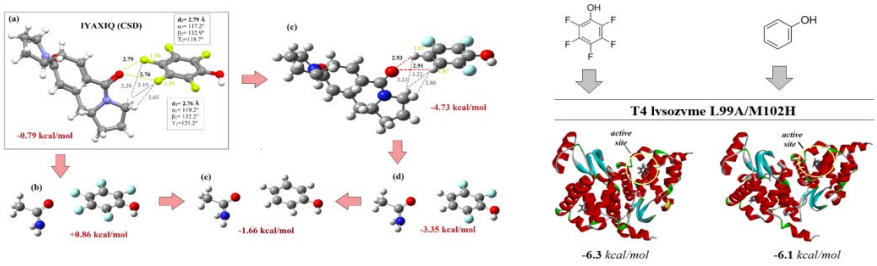
Acknowledgement: This research was supported by the Ministry of Science, Technological Development, and Innovation of the Republic of Serbia (Contract Nos. 451-03-33/2026-03/200288 and 451-03-33/2026-03/200168).

GEOMETRIJSKA PRILAGODLJIVOST AROMATIČNIH F···O INTERAKCIJA

Goran V. Janjić [a] https://orcid.org/0000-0002-4138-2637,
Petar Stanić [b] https://orcid.org/0000-0002-3655-6452,
Katarina Miletić [c] https://orcid.org/0000-0001-9477-6640,
Ivana Veljković [a] https://orcid.org/0000-0003-0584-4053,
Marija Petković Benazzouz [c] https://orcid.org/0000-0003-3526-2054

[a] *Univerzitet u Beogradu – Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju – Institut od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju, Njegoševa 12, 11000 Beograd, Srbija;*
[b] *Institut za informacione tehnologije Kragujevac, Univerzitet u Kragujevcu, Liceja Kneževine Srbije 1A, 34000 Kragujevac, Srbija;* [c] *Univerzitet u Beogradu, Fizički fakultet, Studentski trg 12-16, 11001 Beograd, Srbija*
e-mail: goran.janjic@ihtm.bg.ac.rs

Nekovalentne aromatične F···O interakcije sve više utiču na supramolekulski profil i dizajn funkcionalnih materijala [1]. Ova studija je kombinovala analizu Kembričke baze kristalografskih podataka sa kvantno-mehaničkim proračunima kako bi istražila ove nedovoljno proučene kontakte. U neutralnim sistemima, ove interakcije su slabe (oko - 1,45 kcal/mol) i vođene su disperzionom i elektronsko-izmenjivom stabilizacijom, iako su ograničene Paulijevom repulzijom u poređenju sa alifatičnim analozima. Međutim, uvođenje pozitivnih naelektrisanja dramatično pojačava jačinu interakcije, do -6,34 kcal/mol, nadmašujući vodonične veze u dimeru vode, dok ih negativna naelektrisanja slabe. Uprkos visokoj energetskoj osetljivosti na naelektrisanje, kristalografske geometrije ostaju izuzetno nepromenljive, što ukazuje na to da kristalno pakovanje i kooperativne interakcije imaju dominantnu ulogu. Pored toga, molekulsko dokovanje pokazuje da višestruka fluorizacija pojačava jačinu vezivanja liganda kroz različite, stabilizujuće kontakte između liganda i proteina bez promene preferiranih načina vezivanja, što oslikava kristalografske trendove, gde fluorizacija dosledno optimizuje polarnost i afinitet putem slabih kooperativnih mreža.



[1] M. M. Petković Benazzouz, P. B. Stanić, M. Z. Sarvan, G. V. Janjić, *Cryst. Growth Des*. **25(22)** (2025) 9656–9670.

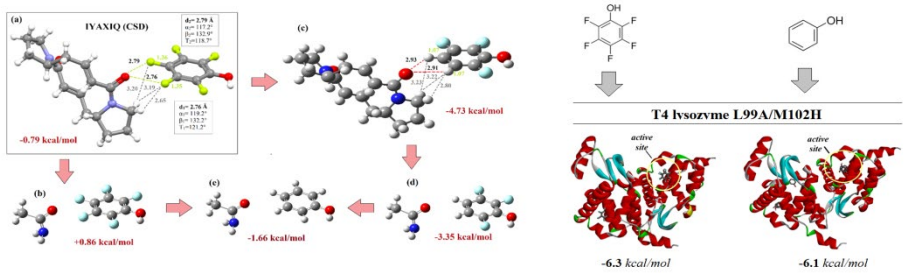
Захвалница: Autori izražavaju zahvalnost Ministarstvu nauke, tehnološkog razvoja i inovacija Republike Srbije na podršci (broj ugovora: 451-03-33/2026-03/200162, 451-03-33/2026-03/200 i 451-03-33/2026-03/200026).

GEOMETRICAL ADAPTABILITY OF AROMATIC F···O INTERACTIONS

Goran V. Janjić [a] https://orcid.org/0000-0002-4138-2637,
Petar Stanić [b] https://orcid.org/0000-0002-3655-6452,
Katarina Miletić [c] https://orcid.org/0000-0001-9477-6640,
Ivana Veljković [a] https://orcid.org/0000-0003-0584-4053,
Marija Petković Benazzouz [c] https://orcid.org/0000-0003-3526-2054

[a] *University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia;* [b] *Institute for Information Technologies Kragujevac, University of Kragujevac, Liceja Knežecine Srbije 1A, 34000 Kragujvac, Serbia;* [c] *University of Belgrade, Faculty of Physics, Studentski trg 12-16, 11001 Belgrade, Serbia*
e-mail: goran.janjic@ihtm.bg.ac.rs

Noncovalent aromatic F···O interactions increasingly influence supramolecular chemistry and functional materials design [1]. This study combined Cambridge Structural Database (CSD) analysis with quantum-mechanical calculations to explore these contacts. In neutral systems, these interactions are weak (-1.45 kcal/mol), driven by dispersion and exchange stabilization, though limited by Pauli repulsion compared to aliphatic analogues. However, introducing positive charges dramatically strengthens them up to -6.34 kcal/mol, surpassing the water dimer hydrogen bond, while negative charges weaken them. Despite the high energetic sensitivity to charge, crystallographic geometries remain remarkably invariant, indicating that crystal packing and cooperative interactions dominate. Furthermore, molecular docking demonstrates that multi-fluorination enhances ligand binding strength through diverse, stabilizing ligand-protein contacts without altering preferred binding modes, mirroring crystallographic trends where fluorination consistently optimizes polarity and affinity via weak cooperative networks.



[1] M. M. Petković Benazzouz, P. B. Stanić, M. Z. Sarvan, G.V. Janjić, *Cryst. Growth Des*. **25(22)** (2025) 9656–9670.

Acknowledgement: The authors would like to express gratitude to the Ministry of Science, Technological Development, and Innovation of the Republic of Serbia for support (Grant No. 451-03-33/2026-03/200162, 451-03-33/2026-03/200378 and 451-03-33/2026-03/200026).

СТРУКТУРНА И СПЕКТРОСКОПСКА КАРАКТЕРИЗАЦИЈА ТЕТРАНУКЕЛАРНОГ АЗИДО КОМПЛЕКСА Cd(II) СА СЕМИКАРБАЗОНСКИМ ЛИГАНДОМ

Мима Јевтовић [a] https://orcid.org/0000-0001-6039-5452,
Милица Савић [b] https://orcid.org/0000-0002-3568-5367,
Марија Павловић [a] https://orcid.org/0009-0003-5198-3713,
Матија Златар [b] https://orcid.org/0000-0002-3809-0940

[a] *Иновациони центар Хемијског факултет д.о.о, Студентски трг 12-6, 11000 Београд, Србија;* [b] *Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију, Институт од националног значаја за Републику Србију, Његошева 12, 11000 Београд, Србија*
e-mail: mima@chem.bg.ac.rs

Синтетисан је и структурно окарактерисан нови Cd(II) комплекс са семикарбазонским лигандом (*E*)-2-(1-(тиазол-2-ил)етилиден)хидразин-1-карбоксамидом (H**L**) и азидо лигандом. Лиганд је добијен реакцијом кондензације семикарбазид-хидрохлорида и 2-ацетилтиазола у воденој средини под киселим условима, док је комплекс $[Cd_4(H\mathbf{L})_4(N_3)_8]$ синтетисан реакцијом лиганда са $Cd(NO_3)_2{\cdot}4H_2O$ у присуству натријум-азида у смеши метанол/вода. Споро упаравање реакционог раствора довело је до формирања жутих монокристала погодних за рендгенску структурну анализу. Комплекс кристалише у триклиничном кристалном систему, просторној групи $P\bar{1}$, и формира центросиметричну тетрануклеарну структуру са јонима Cd(II) међусобно повезаним преко мостних азидо лиганада и атома кисеоника из H**L** лиганда. Координациона сфера кадмијумових јона описује деформисану геометрију координационог броја седам, док се лиганд координује као неутралан тридентатни NNO донор преко азометинског и тиазолног атома азота и карбонилног атома кисеоника. Структурни параметри указују на значајну координациону флексибилност Cd(II) јона и различите начине координације азидо лиганада (мостни и терминални), што доприноси стабилизацији полинуклеарне структуре. ИЦ спектроскопска анализа потврђује координацију лиганда преко померања ν(N–H), ν(C=O) и ν(C=N) вибрација, као и присуство координованих азидо лиганада карактеристичном траком око 2043 cm^{-1}. ^1H и ^{13}C NMR спектри указују на очување хидразонске структуре у раствору и на промене електронске густине у близини донорских атома након координације. Добијени резултати показују да семикарбазонски лиганди у комбинацији са азидо колигандима представљају погодан систем за формирање полинуклеарних Cd(II) комплекса сложене структуре са израженом флексибилношћу.

Захвалница: Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије, Евиденциони бројеви: 451-03-33/2026-03/200288 и 451-03-136/2025-03/200026

STRUCTURAL AND SPECTROSCOPIC CHARACTERIZATION OF A TETRANUCLEAR Cd(II) AZIDO COMPLEX WITH A SEMICARBAZONE LIGAND

Mima Jevtović [a] https://orcid.org/0000-0001-6039-5452,
Milica Savić [b] https://orcid.org/0000-0002-3568-5367,
Marija Pavlović [a] https://orcid.org/0009-0003-5198-3713,
Matija Zlatar [b] https://orcid.org/0000-0002-3809-0940

[a] *Innovative Centre of the Faculty of Chemistry ltd, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia;* [b] *University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia*
e-mail: mima@chem.bg.ac.rs

A novel Cd(II) complex with the semicarbazone ligand (*E*)-2-(1-(thiazol-2-yl)ethylidene)hydrazine-1-carboxamide (H**L**) and an azido ligand was synthesized and structurally characterized. The ligand was obtained by condensation reaction of semicarbazide hydrochloride and 2-acetylthiazole in an aqueous medium under acidic conditions, while the complex $[Cd_4(HL)_4(N_3)_8]$ was synthesized by reaction of the ligand with $Cd(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$ in the presence of sodium azide in a methanol/water mixture. Slow evaporation of the reaction solution resulted in the formation of yellow single crystals suitable for X-ray structural analysis. The complex crystallizes in the triclinic crystal system, space group $P\bar{1}$, and forms a centrosymmetric tetranuclear structure with Cd(II) ions interconnected through bridging azido and oxygen atoms from H**L** ligand. The coordination sphere of the cadmium ions is described as a distorted seven-coordinate geometry, while the ligand coordinates as a neutral tridentate NNO donor through the azomethine nitrogen atom, thiazole nitrogen atom, and carbonyl oxygen atom. Structural parameters indicate significant coordination flexibility of Cd(II) ions and different coordination modes of the azido ligands, which contribute to stabilization of the polynuclear structure. IR spectroscopic analysis confirms ligand coordination through shifts of the ν(N–H), ν(C=O), and ν(C=N) vibrations, as well as the presence of coordinated azido ligands through a characteristic band around 2043 cm^{-1}. The ^{1}H and ^{13}C NMR spectra indicate preservation of the hydrazone structure in solution and changes in electron density near the donor atoms upon coordination. The obtained results demonstrate that semicarbazone ligands combined with azido coligands represent a suitable system for the formation of polynuclear Cd(II) complexes with complex structures and pronounced flexibility.

Acknowledgement: Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia, Contract numbers: 451-03-33/2026-03/200288 and 451-03-136/2025-03/200026

КРИСТАЛНА СТРУКТУРА МУЛТИФЕРОИЧНЕ КЕРАМИКЕ $Bi_{0.9}RE_{0.1}FeO_3$ (RE=La, Nd, Gd, Tb, Ho)

Данијела Луковић Голић [a] orcid.org/0000-0003-0860-3925,
Наташа Јовић Орсини [b] https://orcid.org/0000-0003-1613-3361,
Александар Радојковић [a] https://orcid.org/0000-0003-3319-1280

[a] *Институт за мултидисциплинарна истраживања - Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Кнеза Вишеслава 1, Београд, Србија;* [b] *Институт за нуклеарне науке Винча – Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Мике Петровића Аласа 12-14, 11351 Винча, Београд, Србија*
e-mail: natasaj@vin.bg.ac.rs

Метастабилна природа бизмут ферита ($BiFeO_3$) и испарљивост бизмут оксида на високим температурама отежавају добијање једнофазног материјала. Стабилност ромбоедарске перовскитне фазе може се побољшати заменом јона Fe^{3+} или Bi^{3+} изовалентним јонима. Тада се постиже и побољшање магнетних и фероелектричних својстава материјала [1]. Делимична замена јона бизмута јонима ретких земаља (RE^{3+}) уноси додатну дисторзију у ромбоедарску структуру (S.G. *R*3*c*) бизмут ферита. Различите кристалне структуре су препознате код делимично супституисане керамике бизмут ферита. Уочено је да код узорака допираних лантаноидима на А-позицији, ромбоедарска кристална структура (S.G. *R3c*) постепено прелази у ромбичну (S.G. *Pnma* или *Pbnm*). Овај процес зависи од величине и концентрације лантаноидних јона. Познато је да ова трансформација може бити праћена и појавом прелазних структура описаних симетријама *Pbam* или $Pn2_1a$ [2, 3]. У овом раду праћена је промена кристалне структуре керамике $Bi_{0.9}RE_{0.1}FeO_3$ (RE = La^{3+}, Nd^{3+}, Gd^{3+}, Tb^{3+}, Ho^{3+}) настале синтеровањем прахова добијених калцинацијом прекурсора, припремљених методом хидро-испаравања. Параметри кристалне структуре су првобитно утачњени коришћењем софтвера PDXL (Rigaku Co.), а затим је утачњавање структуре урађено помоћу програма Fullprof. При концентрацији од 10 mol% јона RE^{3+}, поларна *R*3*c* структура остаје доминантна у свим узорцима. Са смањењем јонског радијуса јона RE^{3+}, $r(La^{3+}) = 1{,}032$ Å > $r(Nd^{3+}) > r(Gd^{3+}) > r(Tb^{3+}) > r(Ho^{3+}) = 0{,}901$ Å у координацији 6, и повећањем разлике радијуса јона у односу на јон Bi^{3+} (r = 1,03 Å), запажено је да се параметри решетке $a = b$ смањују, а параметар c повећава. Истовремено, величина кристалита (D_{XRD}) се смањује са 67(4) nm на 46(9) nm, док напрезање унутар решетке (ε) расте од 0,05(2) % за La^{3+} као допант до 0,31(5) % за Ho^{3+} као допант. Мулитна ($Bi_2Fe_4O_9$, S.G. *Pbam*) фаза је присутна у малим количинама у свим узорцима. Ромбична $BiFeO_3$ структура (S.G. *Pnma*) се појављује након супституције јона Bi^{3+} јонима Gd^{3+}, Tb^{3+} или Ho^{3+} у износу од 10 mol%.

Захвалница: Захваљујемо се Матејки Подлогар и Тини Радошевић из Института "Јожеф Стефан" у Љубљани, на снимљеним SEM сликама.
Acknowledgements: We thank Matejka Podlogar and Tina Radošević from the Jožef Stefan Institute in Ljubljana for providing the SEM images.

THE CRYSTAL STRUCTURE OF MULTIFERROIC $Bi_{0.9}RE_{0.1}FeO_3$ (RE=La, Nd, Gd, Tb, Ho) CERAMICS

Danijela Luković Golić [a] https://orcid.org/0000-0003-0860-3925,
Nataša Jović Orsini [b] https://orcid.org/0000-0003-1613-3361,
Aleksandar Radojković [a] https://orcid.org/0000-0003-3319-1280

[a] *Institute for Multidisciplinary Research, Kneza Višeslava 1, Belgrade, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Serbia;* [b] *VINČA Institute of Nuclear Sciences – National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, P.O. Box 522, 11001 Belgrade, Serbia*
e-mail: natasaj@vin.bg.ac.rs

The formation of single-phase bismuth ferrite ($BiFeO_3$) is complicated by both the metastable nature of the material and the volatility of bismuth oxide at high temperatures. Isovalent substitution of Fe^{3+} or Bi^{3+} ions can enhance phase purity and improve magnetic and ferroelectric properties [1]. Partial replacement of bismuth ions with rare earth ions (RE^{3+}) introduces additional distortion to the rhombohedral structure (S.G. *R*3*c*) of bismuth ferrite. Different crystal structures have been recognized for partially substituted bismuth ferrite ceramics. For A-site lanthanide-substituted samples, a transition occurs from the rhombohedral (S.G. *R*3*c*) to the orthorhombic (S.G. *Pnma* or *Pbnm*) crystal structure above a certain substitutional level. Several intermediate symmetries (such as *Pbam* or $Pn2_1a$) have been reported, depending on the size and concentration of the lanthanide ions [2, 3].

This work investigates the crystal structure of pulverized $Bi_{0.9}RE_{0.1}FeO_3$ (RE = La^{3+}, Nd^{3+}, Gd^{3+}, Tb^{3+}, Ho^{3+}) ceramics, which were sintered from powders obtained by calcining precursors prepared using the hydro-evaporation synthesis method. The parameters of the crystal structure were refined by fitting the collected XRD data first using the PDXL software (Rigaku Co.) and then using Fullprof. At a concentration of 10 mol% of the RE^{3+} substituent, the polar *R*3*c* phase remains dominant. The $a = b$ lattice parameters decrease and the c parameter increases as the ionic radius of the substituent ions decreases, $r(La^{3+}) = 1.032$ Å > $r(Nd^{3+}) > r(Gd^{3+}) > r(Tb^{3+}) > r(Ho^{3+}) = 0.901$ Å for CN = 6, increasing the discrepancy with the Bi^{3+} ion (r = 1.03 Å). At the same time, the average crystallite size (D_{XRD}) decreases from 67(4) nm to 46(9) nm, while the lattice strain (ε) increases from 0.05(2) % for the La^{3+} substituent to 0.31(5) % for the Ho^{3+} substituent. The mullite ($Bi_2Fe_4O_9$, S.G. *Pbam*) phase is present in small amounts in all samples. The orthorhombic $BiFeO_3$ phase (S.G. *Pnma*) appears at a concentration of 10 mol% of the Gd^{3+}, Tb^{3+}, or Ho^{3+} as a substituent.

[1] S. M. Selbach, T. Tybell, M. A. Einarsrud, T. Grande, *Chem. Mater*., **21** (2009) 5176.
[2] Z. V. Gabbasova, M. D. Kuzmin, A. K. Zvezdin, I. S. Dubenko, V. A. Murashov, D. N. Rakov, I. B. Krynetsky, *Phys. Lett*. A, **158** (1991) 491.
[3] G. L. Yuan, S. W. Or, J. M. Liu, Z. G. Liu, *Appl. Phys. Lett*., **89** (2006) 052905.

ТЕОРИЈСКО ПРОУЧАВАЊЕ S···S И Se···Se ИНТЕРАКЦИЈА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА МЕТАЛНИХ СУЛФИДА И СЕЛЕНИДА

Марија Калуђеровић [a] https://orcid.org/0009-0007-5800-3107,
Миљан Биговић [a] https://orcid.org/0000-0003-2300-3063,
Ивана С. Вељковић [b] https://orcid.org/0000-0003-0584-4053,
Душан Ж. Вељковић [c] https://orcid.org/0000-0002-1382-8785

[a] *Природно-математички факултет, Универзитет Црне Горе, Подгорица, Црна Гора;* [b] *Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију – Институт од националног значаја за Републику Србију, Београд, Србија;* [c] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12 – 16, Београд, Србија*
e-mail: marija.ka@ucg.ac.me

Халкогене везе спадају у посебну групу нековалентних интеракција код којих регион позитивног електростатичког потенцијала на халкогеном атому интерагује са регионом негативног електростатичког потенцијала на другом атому [1]. Халкогени атоми који се најчешће јављају у овом типу интеракција су сумпор и селен. Иако су халкогене интеракције атома сумпора и селена у органским молекулима детаљно проучаване, систематско проучавање ових интеракција у структурама металних сулфида и селенида још није урађено.

Овде представљамо резултате систематског проучавања особина S···S and Se···Se интеракција у кристалним структурама металних сулфида и селенида издвојених из Кембричке базе структурних података (CSD). На основу резултата анализе кристалних структура направљени су модел системи за рачунање енергија интеракције. Прорачуни енергија интеракције су рађени на MP2/aug-cc-PVTZ нивоу теорије.

Резултати су показали да јачина S···S и Se···Se интеракција у великој мери зависи од геометрије молекула у модел систему. У случају линеарног распореда молекула у димерима ZnS и ZnSe, израчунато је да енергије интеракције износе −3,65 kcal/mol и −3,72 kcal/mol, редом. Међутим, у случају нелинеарног распореда (90°), израчунато је да енергије ових интеракција износе −7,43 kcal/mol и −6,19 kcal/mol, редом. Ова студија је показала и да су резултати анализе кристалних структура у доброј сагласности са резултатима квантнохемијских прорачуна.

[1] L. Vogel, P. Wonner, S. M. Huber, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **58** (2019) 1880–1891.

Захвалница: Ово истраживање је финансијски подржало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (уговор бр. 451-03-33/2026-03/200026 и 451-03-33/2026-03/200168).

THEORETICAL STUDY OF S···S AND Se···Se INTERACTIONS IN CRYSTAL STRUCTURES OF METALLIC SULFIDES AND SELENIDES

Marija Kaluđerović [a] https://orcid.org/0009-0007-5800-3107,
Miljan Bigović [a] https://orcid.org/0000-0003-2300-3063,
Ivana S. Veljković [b] https://orcid.org/0000-0003-0584-4053,
Dušan Ž. Veljković [c] https://orcid.org/0000-0002-1382-8785

[a] *Faculty of Natural Sciences and Mathematics, University of Montenegro, Podgorica, Montenegro;* [b] *University of Belgrade – Institute for Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, Belgrade, Serbia;* [c] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12 – 16, Belgrade, Serbia*
e-mail: marija.ka@ucg.ac.me

Chalcogen bonds represent a non-classical group of non-covalent interactions in which regions of positive electrostatic potential on the surface of chalcogen atom interact with the region of negative electrostatic potential on the surface of another atom [1]. Most common chalcogen atoms that form this type of interaction are sulfur and selenium. Although chalcogen interactions of sulfur and selenium in organic molecules are extensively studied, a systematic study of these interactions in metallic sulfides and selenides has not been performed yet.

Here we present results of the systematic study of characteristics of S···S and Se···Se interactions in crystal structures of metallic sulfides and selenides extracted from Cambridge Structural Database (CSD). Based on the results of analysis of crystal structures, model systems for interaction energy calculations were created. Interaction energy calculations were performed at the MP2/aug-cc-PVTZ level of theory.

The results showed that strength of S···S and Se···Se interactions significantly depend on the geometry of model system. In case of linear arrangement of ZnS and ZnSe dimers, interaction energies were calculated to be −3,65 kcal/mol and −3,72 kcal/mol, respectively. However, in non-linear arrangement (90°), these interactions were calculated to be −7,43 kcal/mol and −6,19 kcal/mol, respectively. The study also showed that the results of analysis of crystal structures are in good agreement with the results of quantum chemical calculations.

[1] L. Vogel, P. Wonner, S. M. Huber, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **58** (2019) 1880–1891.

Acknowledgement: This research has been financially supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract No. 451-03-33/2026-03/200026 and 451-03-33/2026-03/200168).

УПОРЕДНА СТРУКТУРНА АНАЛИЗА ОКСИДОРЕНИЈУМ(V) КОМПЛЕКСА СА АПИГЕНИНОМ И ЊЕГОВИМ БЕНЗИЛ ДЕРИВАТОМ

Ана Кандић [a] https://orcid.org/0009-0002-4709-5628,
Стефан Николић [a] https://orcid.org/0000-0002-0164-134X,
Јелена Пољаревић [b] https://orcid.org/0000-0002-6706-0281,
Antoine Dupé [c] https://orcid.org/0000-0001-7781-0771,
Љиљана Михајловић [a] https://orcid.org/0000-0003-4802-432X

[a] *Иновациони центар Хемијског факултета у Београду,Студентски трг 12-16,*
[b] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Стуентски трг 12-16,*
[c] *Институт за хемију, Универзитет у Грацу, Universitätsplatz 3, Грац, Аустрија*
e-mail: anak@chem.bg.ac.rs

Комплекси ренијума(V) су веома значајни због своје структурне разноврсности и способности Re(V) јона да формира комплексе различите геометрије у чврстом стању [1]. У овом раду представљамо прво истраживање о оксидоренијум (V) комплексима са O,O хелатним лигандима, уз потпуну карактеризацију једињења и њихову рендгенску структурну анализу. Комплекси су синтетисани реакцијом једињења $ReOBr_3(PPh_3)_2$ са апигенином и његовим бензил дериватом у ацетону уз рефлукс. Оба лиганда граде око металног центра деформисану октаедарску геометрију ($ReOBr_2(PPh_3)$(apg)-**C1** и $ReOBr_2(PPh_3)$(Bnapg)-**C2**.
Апигенин се бидентатно координује за Re(V) јон преко два атома кисеоника. Два бромидо лиганда су у *cis* положају један у односу на други, док је фосфински лиганд у *trans* положају у односу на један од њих. С друге стране, код бензил деривата два бромидо лиганда су у *trans* положају, док је фосфински лиганд у *cis* положају у односу на један од њих. Наранџасти кристали комплекса **C1** су добијени прекристализацијом из ацетонирила, док су жути кристали комплекса **C2** добијени из ацетона.

[1] B. Machura, R. Kruszynski, J. Kusz, *Coordination Chemistry Reviews*, **275** (2014) 154–164.

Захвалница: Овај рад је финансиран од програма Европске уније Хоризонт Европа у оквиру Marie Skłodowska-Curie Actions grant споразума No. 101086373 и Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (451-03-33/2026-03/200168, 451-03-33/2026-03/200288).

COMPARATIVE STRUCTURAL STUDY OF OXIDORHENIUM(V) COMPLEXES WITH APIGENIN AND BENZYL-APIGENIN

Ana Kandić [a] https://orcid.org/0009-0002-4709-5628,
Stefan Nikolić [a] https://orcid.org/000-0002-0164-134X,
Jelena Poljarević [b] https://orcid.org/0000-0002-6706-0281,
Antoine Dupé [c] https://orcid.org/0000-0001-7781-0771,
Ljiljana Mihajlović [a] https://orcid.org/0000-0003-4802-432X

[a] *Innovation Center of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;*
[b] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;*
[c] *Institute of Chemistry, University of Graz, Universitätsplatz 3*, *Graz, Austria*
e-mail: anak@chem.bg.ac.rs

Rhenium(V) complexes are of considerable interest because of their diverse structural chemistry and the ability of the Re(V) center to adopt a variety of coordination geometries in the solid state [1]. In this work we present the first comprehensive study of oxidorhenium(V) complexes containing O,O-chelating ligands with full compound characterization and X-ray diffraction analysis. The complexes were synthesized by reacting $ReOBr_3(PPh_3)_2$ with apigeninand its benzyl derivativein acetone under reflux conditions. Both complexes, $ReOBr_2(PPh_3)$(apg)-**C1** and $ReOBr_2(PPh_3)$(Bnapg)-**C2**, show a distorted octahedral coordination around the Re center in the solid state. The apigenin ligand chelates the Re center through two O donor atoms. The two bromido ligands are *cis* to each other, with the phosphine *trans* to one of them. On the other hand, in the benzyl derivative of apigenin, two bromido ligands are *trans* to each other, with phosphine *cis* to one of them. The orange block-shaped crystals **C1** were recrystallized from an acetonitrile solution, while the yellow block-shaped crystals **C2** were obtained from an acetone solution.

[1] B. Machura, R. Kruszynski, J. Kusz, *Coordination Chemistry Reviews*, **275** (2014) 154–164.

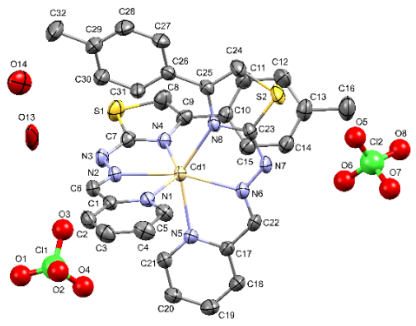
Acknowledgement:This work was supported bythe European Union's Horizon Europe program under the Marie Skłodowska-Curie Actions grant agreement No. 101086373 and the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (451-03-33/2026-03/200168, 451-03-33/2026-03/200288).

СИНТЕЗА И КРИСТАЛОГРАФСКА АНАЛИЗА КОМПЛЕКСА Cd(II) СА ЛИГАНДОМ КЛАСЕ ТИАЗОЛИЛ ХИДРАЗОНА

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

[a] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија;* [b] *Завод за физичку кемију, Институт Руђер Бошковић, Бијеничка цеста 54, 10000 Загреб, Хрватска;* [c] *Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Немањина 6, 11000 Београд, Србија*
e-mail: markovics@chem.bg.ac.rs

Полазећи од истог лиганда 2-(2-(пиридин-2-илметилен)хидразонил)-4-(4-толил)-1,3-тиазола (HLS^3), употребом различитих полазних соли кадмијума(II), синтетисани су комплекси $[Cd(HLS^3)_2](ClO_4)_2\cdot 2H_2O$ (**1**) и $[Cd(LS^3)_2]$ (**2**). Кристалне структуре одређене су дифракцијом X-зрака на монокристалу. Катјонски комплекс **1** кристалише у моноклиничној $P2_1/n$ просторној групи као дихидрат, са два перхлоратна анјона у спољашњој сфери (**Слика 1**), док неутрални комплекс **2** кристалише у моноклиничној просторној групи $P2_1/c$ са једним молекулом у асиметричној јединици (**Слика 2**). Оба комплекса имају дисторговану октаедарску геометрију. Тридентатна координација остварује се преко пиридинског, иминског и тиазоловог атома азота, што доводи до формирања готово планарних петочланих хелатних прстенова. Кристално паковање **1** стабилизовано је мрежом класичних и некласичних водоничних интеракција између комплексних катјона, перхлоратних анјона и молекула воде. Код **2** доминирају некласичне водоничне интеракције које доводе до формирања центросиметричних димера.



Слика 1. ORTEP приказ молекулске структуре комплекса **1** (термални елипсоиди 30% вероватноће). Перхлоратни анјони су приказани моделом куглице и штапића. Атоми водоника су изостављени због прегледности.
Figure 1. ORTEP view of the molecular structure of **1** (thermal ellipsoids at 30% probability). Perchlorate anions are shown using a ball-and-stick model. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

Захвалница: Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Евиденциони бројеви: 451-03-33/2026-03/200168 и 451-03-34/2026-03/200116).

SYNTHESIS AND CRYSTALLOGRAPHIC ANALYSIS OF Cd(II) COMPLEXES WITH A THIAZOLYL HYDRAZONE LIGAND

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

[a] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000, Belgrade, Serbia;* [b] *Division of Physical Chemistry, Institute Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Croatia;* [c] *University of Belgrade – Facultry of Agriculture, Nemanjina 6, 11000 Belgrade, Serbia*
e-mail: markovics@chem.bg.ac.rs

Starting from the same ligand, 2-(2-(pyridin-2-ylmethylene)hydrazonyl)-4-(4-tolyl)-1,3-thiazole (HLS^3), and employing different cadmium(II) precursor salts, the complexes $[Cd(HLS^3)_2](ClO_4)_2 \cdot 2H_2O$ (**1**) and $[Cd(LS^3)_2]$ (**2**) were synthesized. The crystal structures were determined by single-crystal X-ray diffraction. The cationic complex **1** crystallizes in the monoclinic $P2_1/n$ space group as a dihydrate, with two perchlorate anions in the outher coordination sphere (**Fig. 1**), whereas the neutral complex **2** crystallizes in the monoclinic $P2_1/c$ space group with one molecule in the asymmetric unit (**Fig. 2**). Both complexes exhibit distorted octahedral geometries. The tridentate coordination is achieved *via* the pyridine, imine, and thiazole nitrogen atoms, resulting in the formation of nearly planar five-membered chelate rings. The crystal packing of **1** is stabilized by a network of classical and non-classical hydrogen-bonding interactions involving the complex cations, perchlorate anions, and water molecules. In contrast, in **2**, non-classical hydrogen-bonding interactions predominate, leading to the formation of centrosymmetric dimers.

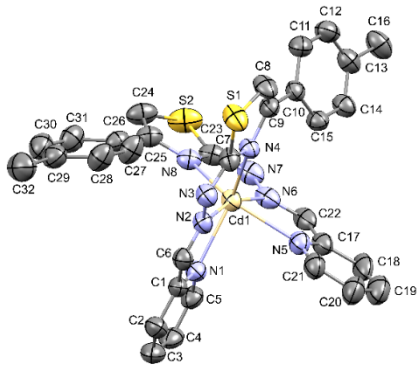


Figure 2. ORTEP drawing of the molecular structure of **2.** Displacement ellipsoids are shown at 30% probability level. All hydrogen atoms are omitted for clarity.
Слика 2. ORTEP приказ молекулске структуре комплекса **2**. Термални елипсоиди су приказани са 30% вероватноће. Сви атоми водоника су изостављени ради прегледности.

Acknowledgement: Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract numbers: 451-03-33/2026-03/200168 & 451-03-34/2026-03/200116).

СТРУКТУРНИ ФАКТОРИ И ЊИХОВ УТИЦАЈ НА ЈАЧИНУ ВОДОНИЧНИХ ВЕЗА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА АЦЕТИЛСАЛИЦИЛНЕ КИСЕЛИНЕ

Данијела Кретић [a] https://orcid.org/0000-0002-8695-3958,
Душан Ж. Вељковић [a] https://orcid.org/0000-0002-1382-8785

[a] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија*
e-mail: danijela@chem.bg.ac.rs

Добро је познато да лекови често показују полиморфизам, који може утицати на њихову фармаколошку активност и перформансе. Молекулска структура и нековалентне интеракције представљају важне показатеље полиморфизма и кристалног паковања у лековима [1]. Постоји јака потреба за унапређењем методологија за предвиђање и детекцију полиморфних облика. Ацетилсалицилна киселина је лек са антиинфламаторним и антипиретичким дејством и јавља се у различитим полиморфним облицима [2]. Они имају различиту растворљивост и фармаколошку активност. Добро је утврђено да таква својства у великој мери зависе од малих разлика у молекулским структурама, као и од типа и јачине формираних нековалентних интеракција.

У овом раду, различите кристалне структуре преузете су из Кембричке базе структурних података (CSD) и анализиране су њихове молекулске геометрије и водоничне везе. Додатно, квантнохемијски прорачуни су изведени на модел системима који садрже ацетилсалицилну киселину и молекул воде, при чему се формира C–H/O интеракција. Резултати указују да мале разлике у молекулској геометрији ацетилсалицилне киселине могу значајно утицати на јачину C–H/O интеракције. Штавише, ове геометријске разлике могу имати кључан ефекат на јачину нековалентних интеракција и, последично, на фармацеутска својства ацетилсалицилне киселине. Анализа података кристалне структуре додатно потврђује значајан утицај молекулске геометрије на јачину водоничних веза. Мапе електростатичког потенцијала такође показују значајан утицај структурних разлика на вредности електростатичког потенцијала у критичним тачкама. Овај теоријски приступ може се користити као значајан алат за анализу и предвиђање полиморфних структура у фармацеутским једињењима.

[1] D. Bond, R. Boese, G. R. Desiraju, *Andgewandte Chemie,* **46** (2007) 615–617.
[2] L. Fijalkowski, M. Skubiszewska, G. Grześk, F. K. Koech, A. Nowaczyk, *Molecules*, **27** (2022) 8412.

Захвалница: Ово истраживање је подржано од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Уговорни број: 451-03-33/2026-03/200168).

STRUCTURAL FACTORS AND THEIR INFLUENCE ON THE STRENGTH OF HYDROGEN BONDS IN THE CRYSTAL STRUCTURES OF ACETYLSALICYLIC ACID

Danijela Kretić [a] https://orcid.org/0000-0002-8695-3958,
Dušan Ž. Veljković [a] https://orcid.org/0000-0002-1382-8785

[a] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia*
e-mail: danijela@chem.bg.ac.rs

It is well-known that pharmaceutical compounds frequently exhibit polymorphism, which may influence their pharmaceutical activity and performance. The molecular structure and noncovalent interactions are important indicators for pharmaceutical polymorphism and crystal packing [1]. There is a strong need to improve methodologies for prediction and detection of polymorphic forms. Acetylsalicylic acid is a pharmaceutical drug with anti-inflammatory and antipyretic effects and exists in different polymorphic structures [2]. These polymorphic forms possess different solubility or pharmaceutical activity. It is well established that such properties strongly depend on small differences in molecular structures as well as on the type and strength of the formed noncovalent interactions.

Herein, different crystal structures were obtained from the Cambridge Structural Database (CSD), and their molecular geometries and hydrogen bonds were analyzed. Additionally, the quantum-chemical calculations were performed on the model systems containing acetylsalicylic acid and water molecule, which form a C–H/O interaction. The results suggest that minor differences in the molecular geometry of acetylsalicylic acid can significantly influence the strength of C–H/O interaction. Moreover, these geometric variations may have a crucial effect on the strength of noncovalent interactions and, consequently, on the pharmaceutical properties of acetylsalicylic acid. The analysis of crystal structure data further confirms the strong impact of molecular geometry on the strength of hydrogen bonds. The electrostatic potential maps also demonstrate the strong effects of structural variations on electrostatic potential values at critical points. This theoretical approach may be used as a significant tool for the analysis and prediction of polymorphic structures in pharmaceuticals.

[1] D. Bond, R. Boese, G. R. Desiraju, *Andgewandte Chemie,* **46** (2007) 615–617.
[2] L. Fijalkowski, M. Skubiszewska, G. Grześk, F. K. Koech, A. Nowaczyk, *Molecules*, **27** (2022) 8412.

Acknowledgement: This research was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia (Contract number: 451-03-33/2026-03/200168).

КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ ОДАБРАНИХ АЗО ПИРИДОНСКИХ БОЈА

Јелена Лађаревић [a] https://orcid.org/0000-0002-5554-7295,
Лидија Радовановић [b] https://orcid.org/0000-0002-7505-6290,
Бојан Божић [c] https://orcid.org/0000-0001-9910-2741,
Александра Машуловић [b] https://orcid.org/0000-0002-5279-7694,
Немања Тришовић [a] https://orcid.org/ 0000-0002-9231-4810,
Јелена Роган [a] https://orcid.org/0000-0002-4147-5251,
Душан Мијин [a] https://orcid.org/0000-0001-5691-2971

[a] *Универзитет у Београду, Технолошко-металуршки факултет, Карнегијева 4, 11120 Београд, Србија;* [b] *Иновациони центар Технолошко-метлуршког факултета у Београду д. о. о., Карнегијева 4, 11120 Београд, Србија;* [c] *Универзитет у Београду, Биолошки факултет, Студентски трг 16, Београд, Србија*
e-mail: jmirkovic@tmf.bg.ac.rs

Азо боје представљају значајну класу једињења чија су разноврсна својства омогућила њихову широку примену у бројним научним и индустријским областима током последњих година. Иако су традиционално повезане са бојењем текстила, ова једињења се данас интензивно користе и у савременим технологијама. Поред тога, њихове структурне карактеристике чине их значајним и у биолошким и фармацеутским истраживањима. Једно од важних својстава које одређује понашање азо боја јесте азо-хидразон таутомерија. С обзиром на то да се ови таутомерни облици значајно разликују по стабилности, спектралним карактеристикама и својствима, утврђивање доминантног облика има велики значај како за теоријска истраживања, тако и за практичну примену. У овом раду приказане су кристалне структуре четири 5-супституисане фенилазо-3-цијано-1-етил-6-хидрокси-4-метил-2-пиридонске боје. Рендгенска структурна анализа показала је да се све испитиване боје налазе у хидразонском облику у чврстом стању. Молекули су у основи планарни, изузев очекиваног одступања етил-групе. У свакој структури таутомер је стабилисан интрамолекулском N–H···O водоничном везом. Кристална паковања ових једињења стабилисана су слабим интермолекулским интеракцијама које укључују C–H···O/N, π–π и слободан електронски пар-π интеракције. Код боја које у својој структури садрже атом хлора, халогене везе додатно доприносе стабилизацији кристалне решетке и супрамолекулској организацији.

Захвалница: Рад је подржан од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Бр. 451-03-33/2026-03/200026, 451-03-34/2026-03/200135 и 451-03-33/2026-03/2001287).

CRYSTAL STRUCTURES OF SELECTED AZO PYRIDONE DYES

Jelena Lađarević [a] https://orcid.org/0000-0002-5554-7295,
Lidija Radovanović [b] https://orcid.org/0000-0002-7505-6290,
Bojan Božić [c] https://orcid.org/0000-0001-9910-2741,
Aleksandra Mašulović [b] https://orcid.org/0000-0002-5279-7694,
Nemanja Trišović [a] https://orcid.org/ 0000-0002-9231-4810,
Jelena Rogan [a] https://orcid.org/0000-0002-4147-5251,
Dušan Mijin [a] https://orcid.org/0000-0001-5691-2971

[a] *University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, 11120 Belgrade, Serbia;* [b] *Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, 11120 Belgrade, Serbia;* [c] *Faculty of Biology, University of Belgrade, Studentski trg 16, Belgrade, Serbia*
e-mail: jmirkovic@tmf.bg.ac.rs

Azo dyes represent an important class of compounds whose versatile properties have enabled their widespread use in numerous scientific and industrial fields during recent years. Although traditionally associated with textile coloration, these materials are now extensively utilized in modern technologies such as liquid crystal displays, optical data storage media, and recording systems. In addition, their structural features have made them increasingly relevant in biological and pharmaceutical investigations. A key characteristic governing the behavior of azo dyes is azo-hydrazone tautomerism. Because the azo and hydrazone tautomers differ significantly in stability, spectral characteristics, and practical performance, establishing the prevailing tautomeric structure is of considerable importance for both theoretical studies and technological applications. In this study, crystal structures of four 5-substituted phenylazo-3-cyano-1-ethyl-6-hydroxy-4-methyl-2-pyridone dyes are reported. Single-crystal X-ray analysis demonstrated that all investigated dyes exist predominantly in the hydrazone form in the solid state. The molecular frameworks are essentially planar, apart from the expected deviation of ethyl group. In each structure, the hydrazone tautomer is stabilized by intramolecular N–H···O hydrogen bond. The crystal packing is stabilized through weak intermolecular interactions involving C–H···O/N contacts, π–π stacking, and lone pair–π interactions. For the chlorine substituted derivatives, halogen bonding additionally contributes to the stabilization of the crystal lattice and supramolecular organization.

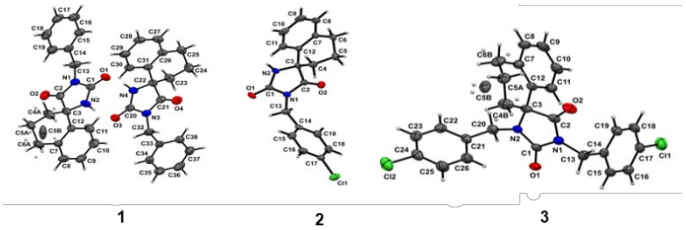
Acknowledgement: This research was funded by the Ministry of Science, Technological Development, and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-33/2026-03/200026, 451-03-34/2026-03/200135 and 451-03-33/2026-03/2001287).

ОДНОС МОЛЕКУЛСКЕ И СУПРАМОЛЕКУЛСКЕ СТРУКТУРЕ КОД ОДАБРАНИХ СПИРОХИДАНТОИНА

Анита Лазић [a] https://orcid.org/ 0000-0003-4855-3782,
Лидија Радовановић [a] https://orcid.org/0000-0002-7505-6290,
Јелена Роган [b] https://orcid.org/ 0000-0002-4147-5251,
Olivier Jeannin [c] https://orcid.org/ 0000-0002-1411-5656,
Franck Camerel [c] https://orcid.org/ 0000-0003-3380-709X,
Sergi Burguera [d] https://orcid.org/ 0000-0001-8226-586X,
Antonio Frontera [d] https://orcid.org/ 0000-0001-7840-2139,
Немања Тришовић [b] https://orcid.org/ 0000-0002-9231-4810

[a] *Иновациони центар Технолошко-метлуршког факултета у Београду, Карнегијева 4, 11120 Београд, Србија;* [b] *Универзитет у Београду, Технолошко-металуршки факултет, Карнегијева 4, 11120 Београд, Србија;* [c] *Универзитет у Рену, Avenue du general Leclerc 263, 35070 Рен, Француска;* [d] *Универзитет Балеарских острва, Crta de Valldemossa Km 7.5, 07122 Палма де Мајорка, Балеарска острва, Шпанија*
e-mail: alazic@tmf.bg.ac.rs

Синтетисана је серија деривата хидантоина добијених од *α*-тетралона (слика 1), а њихове кристалне структуре одређене су методом рендгенске структурне анализе [1]. Кристалне структуре једињења **1** и **2** првенствено су стабилизоване N–H···O водоничним везама, при чему се формирају $R_2^2(8)$ димери. Међутим, умерене и слабе међумолекулске интеракције имају важну улогу у образовању супрамолекулских архитектура, нарочито код једињења **3**, код кога N–H···O водоничне везе нису нађене. Прорачуни енергија интеракција и мапирање површине молекулског електростатичког потенцијала (MEP) омогућили су успостављање хијерархије водоничних веза које укључују различита акцепторска места.



Слика 1. ORTEP приказ проучаваних једињења [1].

[1] A. Lazić, L. Radovanović, J. Rogan, O. Jeannin, F. Camerel, S. Burguera, A. Frontera, N. Trišović, *Cryst. Growth Des.* **25** (2025) 10413–10428.

Захвалница: Рад је подржан од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Бр. 451-03-34/2026-03/200135 и 451-03-33/2026-03/200287).

RELATIONSHIP BETWEEN THE MOLECULAR AND SUPRAMOLECULAR STRUCTURE IN SELECTED SPIROHYDANTOINS

Anita Lazić [a] https://orcid.org/ 0000-0003-4855-3782,
Lidija Radovanović [a] https://orcid.org/0000-0002-7505-6290,
Jelena Rogan [b] https://orcid.org/ 0000-0002-4147-5251,
Olivier Jeannin [c] https://orcid.org/ 0000-0002-1411-5656,
Franck Camerel [c] https://orcid.org/ 0000-0003-3380-709X,
Sergi Burguera [d] https://orcid.org/ 0000-0001-8226-586X,
Antonio Frontera [d] https://orcid.org/ 0000-0001-7840-2139,
Nemanja Trišović [b] https://orcid.org/ 0000-0002-9231-4810

[a] *Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, 11120 Belgrade, Serbia;* [b] *University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, 11120 Belgrade, Serbia;* [c] *University of Rennes, CNRS, ISCR, Avenue du general Leclerc 263, 35070 Rennes, France;* [d] *Universitat de les Illes Balears, Crta de Valldemossa Km 7.5, 07122 Palma de Mallorca, Baleares, Spain*
e-mail: alazic@tmf.bg.ac.rs

A series of hydantoin derivatives derived from α-tetralone (Figure 1) was synthesized, and their crystal structures were determined by single-crystal X-ray diffraction [1]. The crystal structures of compounds **1** and **2** are primarily stabilized by N–H···O hydrogen bonds, forming $R_2^2(8)$ dimers. However, medium to weak intermolecular interactions play an important role in the development of the supramolecular architectures, particularly in compound **3**, where N–H···O hydrogen bonds are absent. Interaction energy calculations and molecular electrostatic potential (MEP) surface mapping further enabled to establish the hierarchy of hydrogen bonds involving different acceptor sites.

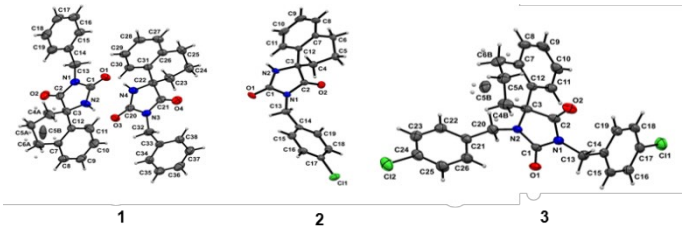


Figure 1. ORTEP presentation of the targeted compounds [1].

[1] A. Lazić, L. Radovanović, J. Rogan, O. Jeannin, F. Camerel, S. Burguera, A. Frontera, N. Trišović, *Cryst. Growth Des.* **25** (2025) 10413–10428.

Acknowledgement: This research was funded by the Ministry of Science, Technological Development, and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-34/2026-03/200135 and 451-03-33/2026-03/200287).

СТЕКИНГ ИНТЕРАКЦИЈЕ ИЛИ ВОДОНИЧНЕ ВЕЗЕ? КРИСТАЛОГРАФСКО И КВАНТНОХЕМИЈСКО ПРОУЧАВАЊЕ ДИМЕРА ТРИАЗИНА

Миленко М. Буновић [a] https://orcid.org/0009-0006-8119-5103,
Катарина А. Ћеранић [a] https://orcid.org/0009-0000-1688-5972,
Душан П. Маленов [c] https://orcid.org/0000-0002-3060-3377

[a] *Иновациони центар Хемијског факултета, Београд, Србија;*
[b] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Београд, Србија*
e-mail: malenov@chem.bg.ac.rs

1,3,5-триазин представља веома важну градивну јединицу у супрамолекулској хемији [1], захваљујући својој структурној свестраности. Док ароматични прстен омогућава остваривање стекинг интеракција, као и интеракција са катјонима и анјонима [2], атоми азота омогућавају формирање водоничних веза. Поред тога, могућност увођења супституената пружа додатну контролу над функцијом и понашањем при самоорганизацији [3].

У овом раду проучавали смо нековалентне интеракције између међусобно паралелних триазина претрагом Кембричке базе структурних података. Наша претрага показала је значајан број стекинг интеракција, које су биле и *face-to-face* и паралелно-померене, при чему је антипаралелна оријентација била изразито доминантна. Поред тога, при великим хоризонталним померањима уочен је значајан број двоструких водоничних веза, које су углавном биле N–H···N водоничне везе аминотриазина, као и C–H···N водоничне везе несупституисаног триазина.

Прорачуни засновани на теорији функционала густине на несупституисаном триазину показали су да су стекинг интеракције и водоничне везе (C–H···N) конкурентне по јачини (око −4,0 kcal/mol). Ово понашање се драстично мења у случају триаминотриазина, који се често среће у кристалним структурама, јер он не само да остварује нешто јаче стекинг интеракције (−4,5 kcal/mol), већ формира и знатно јаче (N–H···N) водоничне везе (−11,0 kcal/mol) у поређењу са несупституисаним триазином.

[1] L. Escobar, C. Hunter, *Org. Biomol. Chem.*, **23** (2025) 3520–3534.
[2] C. Garau, D. Quinonero, A. Frontera, P. Ballester, A. Costa, P. Deya, *Org. Lett.*, **5** (2003) 2227–2229.
[3] T. Mooibroek, P. Gamez, *Inorg. Chim. Acta*, **360** (2007) 381–404.

Захвалница: Ово истраживање је инспирисано нашим радом на пројекту „Оснаживање студената хемије у откривању нековалентних интеракција коришћењем Кембричке базе структурних података – CSD4NCI радионица“, који је финансиран од стране Кембричког центра за кристалографске податке у оквиру иницијативе CCDC Engagement Grants. Рад је финансиран од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (уговори 451-03-33/2026-03/200168 and 451-03-33/2026-03/200288).

STACKING INTERACTIONS OR HYDROGEN BONDS? CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM CHEMICAL STUDY OF TRIAZINE DIMERS

Milenko M. Bunović [a] https://orcid.org/0009-0006-8119-5103,
Katarina A. Ćeranić [a] https://orcid.org/0009-0000-1688-5972,
Dušan P. Malenov [c] https://orcid.org/0000-0002-3060-3377

[a] *Innovative Centre of the Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia;* [b] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia*
e-mail: malenov@chem.bg.ac.rs

1,3,5-Triazine is a very important building unit in supramolecular chemistry [1], due to its structural versatility. While aromatic ring provides the possibility of stacking interactions, as well as interactions with both cations and anions [2], nitrogen enables the formation of hydrogen bonds. Moreover, the possibility of adding substituents can provide more control in function and assembly behavior [3].

In this work, we have studied noncovalent interactions between mutually parallel triazines by searching the Cambridge Structural Database. Our search yielded significant number of stacking interactions, which were both *face-to-face* and parallel-displaced, with antiparallel orientation being very dominant. In addition, at large horizontal displacements significant number of double hydrogen bonds was found, which were primarily N–H···N hydrogen bonds of aminotriazines, as well as C–H···N hydrogen bonds of unsubstituted triazine.

Density functional theory calculations on unsubstituted triazine showed competitive strengths of stacking interactions and C–H···N hydrogen bonds (about −4.0 kcal/mol). This behaviour drastically changes in the case of triaminotriazine, frequently encountered in crystal structures, which not only forms somewhat stronger stacking interactions (−4.5 kcal/mol), but also forms significantly stronger (N–H···N) hydrogen bonds (−11.0 kcal/mol) than unsubstituted triazine.

[1] L. Escobar, C. Hunter, *Org. Biomol. Chem.*, **23** (2025) 3520–3534.
[2] C. Garau, D. Quinonero, A. Frontera, P. Ballester, A. Costa, P. Deya, *Org. Lett.*, **5** (2003) 2227–2229.
[3] T. Mooibroek, P. Gamez, *Inorg. Chim. Acta*, **360** (2007) 381–404.

Acknowledgement: This research was inspired by our work on the project Empowering Chemistry Students to Discover Noncovalent Interactions via the Cambridge Structural Database – CSD4NCI Workshop, which was funded by the Cambridge Crystallographic Data Centre under the framework of CCDC Engagement Grants. The work was funded by the Ministry of Science, Technological Development and Innovations of the Republic of Serbia (contracts number: 451-03-33/2026-03/200168 and 451-03-33/2026-03/200288).

РАЗЛИКЕ У ГЕОМЕТРИЈАМА КРИСТАЛНИХ СТРУКТУРА УТИЧУ НА ВРЕДНОСТИ HOMO–LUMO ЕНЕРГЕТСКОГ РАЗМАКА НИТРОАРОМАТИЧНИХ ЕКСПЛОЗИВА

Весна Б. Медаковић [a] https://orcid.org/0000-0001-9022-3168,
Ивана С. Вељковић [b] https://orcid.org/0000-0003-0584-4053,
Душан Ж. Вељковић [a] https://orcid.org/0000-0002-1382-8785

[a] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12 – 16, Београд, Србија;* [b] *Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију – Институт од националног значаја за Републику Србију, Београд, Србија*
e-mail: vesnam@chem.bg.ac.rs

Вредност HOMO–LUMO енергетског размака је један од најпознатијих индикатора детонационих карактеристика нитроароматичних експлозива [1]. Велика разлика у енергијама HOMO и LUMO орбитала је повезана са високом стабилношћу молекула, што је значајан фактор који утиче на механичку осетљивост високоенергетских материјала. Са друге стране, анализа кристалних структура нитроароматичних молекула је показала да мале разлике у геометријама истих високоенергетских нитроароматичних молекула могу да доведу до значајних разлика у вредностима квантнохемијских индикатора осетљивости ових молекула [2].

У овом раду смо анализирали утицај малих разлика у геометријској структури нитроароматичних молекула на вредности HOMO–LUMO енергетског размака одабраних нитроароматичних експлозива. Геометрије проучаваних молекула су преузете из Кембричке базе структурних података (CSD) и употребљене за прорачуне вредности HOMO–LUMO енергетског размака. Прорачуни су урађени коришћењем Фенски–Хол методе и Jimp 2 софтвера.

Резултати су показали да мале девијације у геометрији могу да узрокују значајне разлике у вредностима HOMO–LUMO енергетског размака за исте молекуле. Резултати су такође показали да су вредности HOMO–LUMO енергетског размака израчунате Фенски–Хол методом у доброј сагласности са експерименталним вредностима.

[1] P. Ravi, G. M. Gore, S. P. Tewari, A. K. Sikder, *Molecular Simulation*, **38** (2012) 218–226.
[2] D. S. Kretić, V. B. Medaković, D. Ž. Veljković, *Crystals*, **12** (2022) 1455.

Захвалница: Ово истраживање је финансијски подржало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (уговор бр. 451-03-33/2026-03/200026 и 451-03-33/2026-03/200168).

DIFFERENCES IN CRYSTAL STRUCTURE GEOMETRIES AFFECT HOMO–LUMO GAP VALUES OF NITROAROMATIC MOLECULES

Vesna B. Medaković [a] https://orcid.org/0000-0001-9022-3168,
Ivana S. Veljković [b] https://orcid.org/0000-0003-0584-4053,
Dušan Ž. Veljković [a] https://orcid.org/0000-0002-1382-8785

[a] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12 – 16, Belgrade, Serbia;*
[b] *University of Belgrade – Institute for Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, Belgrade, Serbia*
e-mail: vesnam@chem.bg.ac.rs

The HOMO–LUMO gap value is one of the most well-known indicators of the detonation characteristics of nitroaromatic explosives [1]. Large HOMO–LUMO energy gap values are related to the high stability of molecules, which is a significant factor that affects mechanical sensitivity of high-energy materials. On the other hand, analysis of crystal structures of nitroaromatic molecules showed that small differences in geometries of the same nitroaromatic high-energy molecules lead to significant differences in the values of quantum chemical indicators of the sensitivity of these molecules [2].

In this work, we have analyzed the influence of small differences in geometrical structures of nitroaromatic molecules on HOMO–LUMO gaps of selected nitroaromatic explosives. Geometries of studied molecules were extracted from Cambridge Structural Database (CSD) and used further for HOMO–LUMO gap calculations. Calculations were done using Fenske–Hall method and Jimp 2 software.

The results showed that small deviations in geometries may lead to the significant differences in HOMO–LUMO gap values for the same molecules. Results also showed that HOMO–LUMO gap energies calculated using Fenske–Hall method are in good agreement with experimentally obtained band gap energies.

[1] P. Ravi, G. M. Gore, S. P. Tewari, A. K. Sikder, *Molecular Simulation*, **38** (2012) 218–226.
[2] D. S. Kretić, V. B. Medaković, D. Ž. Veljković, *Crystals*, **12** (2022) 1455.

Acknowledgement: This research has been financially supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract No. 451-03-33/2026-03/200026 and 451-03-33/2026-03/200168).

ХИДРОСТАБИЛНОСТ РАЗЛИЧИТИХ ZIF-8 СТРУКТУРА ЗА УКЛАЊАЊЕ АРСЕНА ИЗ ПРИРОДНИХ ВОДА

Мирјана Милић [a] https://orcid.org/0000-0002-0285-2819,
Биљана Дојчиновић [b] https://orcid.org/0000-0003-1479-8060,
Братислав Антић [a] https://orcid.org/0000-0002-5693-6401

[a] *Институт за нуклеарне науке Винча, Универзитет у Београду П.П.522, 11001, Београд, Србија;* [b]*Институт за хемију, технологију и металургију, Универзитет у Београду, Његошева 12, 11000 Београд, Србија*
e-mail: mikac@vin.bg.ac.rs

Захваљујући својој микропорозности и великој специфичној површини, зеолитна имидазолатна мрежа - 8 (ZIF-8), представља перспективни агенс за уклањање тешких метала из пијаћих и отпадних вода. Иако се обично сматра да ZIF-8 поседује релативно добру хидростабилност, нека истраживања показују да у воденој средини подлеже хидролизи што доводи до промене структурне фазе и даље деградације. Његова стабилност у води одређена је дејством различитих фактора као што су *pH*, температура, метод синтезе, концентрација, присуство других јона итд. Стога је за практичну примену адсорбената на бази ZIF-8 мрежа од суштинске важности одређивање њихове стабилности у условима карактеристичним за дату примену.

У овом раду испитивана је хидростабилност три различито припремљена ZIF-8 узорка, намењена адсорпцији арсена из природно контаминираних вода. Тестови стабилности вршени су у амбијеталним условима, при масеном односу ZIF-8/вода од 0,10%, у дестилованој води (H_2O) и у арсеном контаминираној води узоркованој из градског водовода у Тарашу (Војводина, Србија) (садржај арсена ≈227 μg L^{-1}, што знатно превазилази безбедносну границу СЗО арсена у пијаћој води од 10 μg L^{-1}). Стабилност испитиваних узорака процењена је помоћу рендгенске дифракције на праху (XRPD) и инфрацрвене спектроскопије са Фуријеовом трансформацијом (FTIR). Сви узорци су показали добру стабилност у H_2O, задржавајући карактеристичну кристалну структуру ZIF-8 након 24 сата. У присуству јона арсена и других јонских врста садржаних у узорку природне воде, XRPD дифрактограми узорка ZIF-8 припремљеног коришћењем цинк-ацетата и узорка припремљеног из (Zn, Zn) хидрокси-двоструке соли (HDS) као прекурсора, садржавали су додатне пикове на 2θ ≈ 11,04°,16,7°,19,0° итд., што указује на појаву нове кристалне фазе. Насупрот томе, XRPD дифрактограм и FTIR спектар узорка ZIF-8 допираног никлом (Ni ≈ 0,2%) нису показали фазну трансформацију нити значајне знаке структурне деградације, што имплицира његову хидролитичку стабилност и погодност за предвиђену примену.

Захвалница: Овај рад је подржан од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (ев.бр. 451-03-33/2026-03/ 200017).

HYDROLYTIC STABILITY OF VARIOUS ZIF-8 STRUCTURES FOR ARSENIC REMOVAL FROM NATURAL WATERS

Mirjana Milić [a] https://orcid.org/0000-0002-0285-2819,
Biljana Dojčinović [b] https://orcid.org/0000-0003-1479-8060,
Bratislav Antić [a] https://orcid.org/0000-0002-5693-6401

[a] *VINČA Institute of Nuclear Sciences, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, POB522, Belgrade, Serbia;* [b] *Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia*
e-mail: mikac@vin.bg.ac.rs

Owing to its microporosity and large surface area, zeolitic imidazolate framework-8 (ZIF-8), a typical low-valent metal-organic framework (MOF), is a promising agent for heavy metal removal from drinking water and wastewater. Although ZIF-8 is generally considered to possess relatively high water stability, some studies demonstrate that it undergoes hydrolysis in aqueous systems leading to a phase change and degradation. Its hydrostability is governed by various factors including pH, temperature, synthesis method, concentration, presence of different ions etc. Therefore, evaluating the structural stability of the ZIF-8 based adsorbents under the specific operating conditions is of utmost importance for their practical application.

In this work, we investigated water stability of three differently prepared ZIF-8 samples aimed at adsorption of various arsenic species from naturally contaminated waters. Stability tests were performed under ambient conditions at a ZIF-8/water mass ratio of 0.10 wt.% using both distilled water (H_2O) and arsenic contaminated tap water sample (sourced from municipal supply of Taraš (Vojvodina, Serbia) with total As concentration ≈227 μg L^{-1}, well exceeding the WHO drinking-water safety limit of 10 μg L^{-1}). The stability of the studied samples was evaluated using X-ray powder diffraction (XRPD) and Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR). All samples demonstrated good stability in H_2O, maintaining the characteristic ZIF-8 crystalline structure after 24 hours. In the presence of As ions and other ion species contained in the natural water sample, the ZIF-8 sample prepared using zinc acetate and the sample prepared via the (Zn, Zn) hydroxy double salt (HDS) precursor, exhibited XRPD patterns with additional peaks at $2\theta \approx 11.04$ °, 16.7 °, 19.0°, etc., which suggested appearance of a new crystalline phase. In contrast, the XRPD pattern and FTIR spectrum of the Ni (≈ 0.2%) doped ZIF-8 sample showed no phase change or significant signs of structural degradation, thereby implying its stability against hydrolysis and suitability for the intended application.

Acknowledgement: This research was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract No. 451-03-33/2026-03/ 200017).

СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА АДСОРБЕНТА α-Bi_2O_3 МОДИФИКОВАНОГ ХИТОЗАНОМ

Наталија Милојковић [a] https://orcid.org/0000-0002-6112-6219,
Бојана Симовић [b] https://orcid.org/0000-0002-9407-155X,
Лидија Радовановић [c] https://orcid.org/0000-0002-7505-6290,i
Горан Бранковић [b] https://orcid.org/0000-0002-4151-1208,
Јелена Гулицовски [d] https://orcid.org/0000-0001-5553-8236,
Александра Дапчевић [a] https://orcid.org/0000-0001-7650-7156

[a] *Технолошко-металуршки факултет, Универзитет у Београду, Београд, Србија;* [b] *Институт за мултидисциплинарна истраживања, Универзитет у Београду, Београд, Србија;* [c] *Иновациони центар Технолошко-металуршког факултета, Београд, Србија;* [d] *Институт за нуклеарне науке "Винча", Универзитет у Београду, Београд, Србија*
e-mail: nmilojkovic@tmf.bg.ac.rs

Услед изузетних својстава и широког спектра примене, бизмут(III)-оксид се све интензивније проучава. Показало се да се својства оксида могу побољшати увођењем стабилизатора, попут биополимера, у реакциону смешу током синтезе.

У циљу добијања бизмут(III)-оксида модификованог хитозаном (Ch/Bi_2O_3), $Bi(NO_3)_3{\cdot}5H_2O$ је растворен у раствору HNO_3 (c = 5 mol dm^{-3}), након чега је додаван раствор NaOH (c = 10 mol dm^{-3}) све док pH-вредност није износила 12. У добијену суспензију додато је 25 cm^3 раствора хитозана у сирћетној киселини. Суспензија је хомогенизована током 24 h, хидротермално третирана (120 °C, 12 h), испирана етанолом и водом и сушена (100 °C, 1 h). На идентичан начин, али без додатка хитозана, синтетисан је чист α-Bi_2O_3 (Bi_2O_3). Добијени прахови окарактерисани су XRD, FTIR, FESEM, EDS и SAED/HRTEM методама, одређена им је тачка нултог наелектрисања, док су њихова адсорпциона својства испитана на токсичној азо боји реактивно наранџастој 16 (RO16).

Рендгенском дифракцијом је утврђено да је у обе синтезе добијен моноклинични α-Bi_2O_3 ($P2_1/c$), са незнатним разликама у параметрима јединичне ћелије (a = 5,840(1) и 5,834(2) Å, b = 8,158(1) и 8,157(2) Å, c = 7,506(2) и 7,495(3) Å, β = 113,00(1) и 112,96(2)°, за Ch/Bi_2O_3 и Bi_2O_3, редом), што потврђује да је кристална структура α-Bi_2O_3 очувана упркос додатку хитозана. Величина кристалита за Ch/Bi_2O_3 и Bi_2O_3 износи 74(1) и 78(2) nm, редом. На микрографијама се уочава да чист Bi_2O_3 кристалише у виду микроштапића величине 1−4,5 μm, а Ch/Bi_2O_3 у виду нанолистића величине око 750 nm. Индицирањем рефлексија добијених електронском дифракцијом, као и одређивањем међупљосних растојања, потврђено је да узорци кристалишу у моноклиничној структури α-Bi_2O_3 и просторној групи $P2_1/c$. Ch/Bi_2O_3 је показао изузетна адсорпциона својства, уклонивши 99% боје RO16 након 15 min, за разлику од Bi_2O_3 који је током 1 h адсорбовао 5% боје. Ово се објашњава чињеницом да је површина чистог α-Bi_2O_3 богата OH^--јонима, за разлику од α-Bi_2O_3 модификованог хитозаном, због чега одбија анјонску боју RO16.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF CHITOSAN-MODIFIED α-Bi_2O_3 ADSORBENT

Natalija Milojković [a] https://orcid.org/0000-0002-6112-6219,
Bojana Simović [b] https://orcid.org/0000-0002-9407-155X,
Lidija Radovanović [c] https://orcid.org/0000-0002-7505-6290,
Goran Branković [b] https://orcid.org/0000-0002-4151-1208,
Jelena Gulicovski [d] https://orcid.org/0000-0001-5553-8236,
Aleksandra Dapčević [a] https://orcid.org/0000-0001-7650-7156

[a] *Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia;*
[b] *Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Belgrade, Serbia;*
[c] *Innovation Center of the Faculty of Technology and Metallurgy Ltd. in Belgrade, Belgrade, Serbia;* [d] *Institute of Nuclear Sciences "Vinča", University of Belgrade, Belgrade, Serbia*
e-mail: nmilojkovic@tmf.bg.ac.rs

Bismuth(III) oxide attracts increasing interest regarding its extraordinary properties and wide range of applications. Still, those oxide properties can be improved by the incorporation of stabilizing agents, like biopolymers, during synthesis.

With the aim to synthesize the chitosan-modified Bi_2O_3 (Ch/Bi_2O_3), $Bi(NO_3)_3{\cdot}5H_2O$ was dissolved in a HNO_3 solution (c = 5 mol dm^{-3}), and afterwards a NaOH solution was added (c = 10 mol dm^{-3}) until the pH was 12. Subsequently, 25 cm^3 of the chitosan solution in acetic acid was introduced to the obtained suspension. The suspension was homogenized during 24 h, hydrothermally treated (120 °C, 12 h), rinsed with ethanol and water, and dried (100 °C, 1 h). The same synthesis procedure, but without the addition of chitosan, was applied to obtain the pristine α-Bi_2O_3 (Bi_2O_3). The prepared powders were characterized by XRD, FTIR, FESEM, EDS and SAED/HRTEM methods, the point of zero charge was determined, while their adsorption properties were investigated towards toxic azo dye Reactive Orange 16 (RO16).

XRD revealed that the monoclinic α-Bi_2O_3 ($P2_1/c$) was obtained in the case of both samples, with negligible differences in unit cell parameters (a = 5.840(1) and 5.834(2) Å, b = 8.158(1) and 8.157(2) Å, c = 7.506(2) and 7.495(3) Å, β = 113.00(1) and 112.96(2)°, for Ch/Bi_2O_3 and Bi_2O_3, respectively) confirming that the crystal structure of α-Bi_2O_3 was intact despite the addition of chitosan. The crystallite size of Ch/Bi_2O_3 and Bi_2O_3 amounted 74(1) nm and 78(2) nm, respectively. According to FESEM analysis, Bi_2O_3 crystallizes in a shape of microrods sized of 1−4.5 μm, while Ch/Bi_2O_3 crystallizes as nanosheets of about 750 nm. By indexing of the reflections obtained by electronic diffraction as well as by determination of interplanar distances, it was confirmed that the samples crystallized in the monoclinic structure of α-Bi_2O_3 and space group $P2_1/c$. The Ch/Bi_2O_3 demonstrated extraordinary adsorption properties, since it removed 99% of RO16 dye after 15 min contrary to the Bi_2O_3, which adsorbed 5% of the dye after 1 h. This can be explained by the fact that the surface of the pristine α-Bi_2O_3 is rich in OH^--ions, unlike chitosan-modified α-Bi_2O_3, resulting in the repulsion of the anionic RO16 dye.

СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА БАРИЈУМ-СТАНАТА ДОПИРАНОГ ИНДИЈУМОМ ДОБИЈЕНОГ ТЕХНИКОМ ХЛАДНОГ СИНТЕРОВАЊА

Јелена Митровић [a] https://orcid.org/0000-0002-7372-4064,
Матејка Подлогар [b] https://orcid.org/0000-0001-7892-8608,
Милица Почуча-Нешић [a] https://orcid.org/0000-0002-9341-45621,
Оливера Земљак [a] https://orcid.org/0000-0002-9387-6815,
Александар Малешевић [a] https://orcid.org/0000-0001-5775-4485,
Александар Радојковић [a] https://orcid.org/0000-0003-3319-1280,
Тина Радошевић [b] https://orcid.org/0009-0004-0894-8266,
Мојца Отоничар [c] https:// orcid.org/0000-0002-1657-0345,
Зорица Бранковић [a] https://orcid.org/0000-0001-7231-8235,
Горан Бранковић [a] https://orcid.org/0000-0002-4151-1208

[a] *Универзитет у Београду, Институт за мултидисциплинарна истраживања, Кнеза Вишеслава 1, Београд, Србија;* [b] *Институт Јожеф Стефан, Одсек за наноструктурне материјале, Јамова Цеста 39, Љубљана, Словенија;* [c] *Институт Јожеф Стефан, Одсек за електронску керамику, Јамова Цеста 39, Љубљана, Словенија*
e-mail: jelena.vukasinovic@imsi.bg.ac.rs

Техника хладног синтеровања омогућава добијање керамичког материјала велике густине са уређеном микроструктуром уз додатак „краткотрајног“ растварача, односно течне фазе, у нискотемпературном режиму рада (25 °C до 300 °C) у трајању од 5 мин до 3 сата [1].

У овом раду су испитивани керамички узорци састава $BaSn_{1-x}In_xO_3$, BSIO (x = 0,00; 0,05; 0,10; 0,15; и 0,20) добијени техником хладног синтеровања на температури од 300 °C током 3 сата при брзини загревања и хлађења од 2 °C/мин, уз додатак воденог раствора KOH/NaOH (10 масених %) као течне фазе, на притиску од 670 MPa. Густине добијених BSIO керамичких узорака су у опсегу од 89 до 95% теоријске густине. Методом рендгенске анализе на поликристалном материјалу (XRD) је потврђено присуство кубног $BaSnO_3$, али и присуство орторомбичног $BaCO_3$, чији се удео повећао додатком допанта, са 0,7% на 2,8% код узорка са x = 0,05, док је даље повећање концентрације допанта довело до смањења удела ове фазе. Код узорака са x = 0,15 и x = 0,20 In потврђено је и присуство тетрагоналног SnO_2, чији је удео 1,2% и 2,0% редом. Допирање индијумом је довело до повећања параметра јединичне ћелије (a) што указује на уградњу In(III) на место Sn(IV) у решетки $BaSnO_3$. Микроструктурна анализа BSIO керамичких узорака је урађена применом скенирајуће електронске микроскопије емисијом електрона пољем (FESEM) и потврдила је пристуство зрна субмикронске величине код свих узорака, чије се вредности крећу од 200 nm до скоро 1 μm за недопиран узорак, и од 100 nm до 0,5 μm за допиране узорке.

[1] H. Guo, A. Baker, J. Guo, C. A. Randall, *ACS Nano*, **10** (2016) 10606−10614.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF THE INDIUM DOPED BARIUM STANNATE OBTAINED BY COLD SINTERING TECHNIQUE

Jelena Mitrović [a] https://orcid.org/0000-0002-7372-4064,
Matejka Podlogar [b] https://orcid.org/0000-0001-7892-8608,
Milica Počuča-Nešić [a] https://orcid.org/0000-0002-9341-45621,
Olivera Zemljak [a] https://orcid.org/0000-0002-9387-6815,
Aleksandar Malešević [a] https://orcid.org/0000-0001-5775-4485,
Aleksandar Radojković [a] https://orcid.org/0000-0003-3319-1280,
Tina Radošević [b] https://orcid.org/0009-0004-0894-8266,
Mojca Otoničar [c] https:// orcid.org/0000-0002-1657-0345,
Zorica Branković [a] https://orcid.org/0000-0001-7231-8235,
Goran Branković [a] https://orcid.org/0000-0002-4151-1208

[a] *University of Belgrade, Institute for Multidisciplinary Research, Kneza Višeslava 1, 11030, Belgrade, Serbia;* [b] *Jožef Stefan Institute, Department for Nanostructured Materials, Jamova cesta 39, 1000 Ljubljana, Slovenia;* [c] *Jožef Stefan Institute, Electronic Ceramics Department, Jamova cesta 39, 1000 Ljubljana, Slovenia*
e-mail: jelena.vukasinovic@imsi.bg.ac.rs

The cold sintering technique allows preparation of dense ceramic materials with well-ordered microstructure using transient solvent, *i.e*. a liquid phase, in a low-temperature range (25 °C to 300 °C) for a duration of 5 min to 3 hours [1].

In this work, we investigated the ceramic samples with composition $BaSn_{1-x}In_xO_3$, BSIO (x = 0.00; 0.05; 0.10; 0.15; and 0.20) obtained by cold sintering technique at a temperature of 300 °C for 3 hours with heating and cooling rate of 2 °C/min, using 10 wt % KOH/NaOH as a liquid phase, at a pressure of 670 MPa. The densities of BSIO ceramic samples ranged from 89 to 95% ρ_t. The presence of cubic $BaSnO_3$ was confirmed by X-ray diffraction (XRD) on polycrystalline material, but also the presence of orthorhombic $BaCO_3$, whose content increased with the addition of dopant, from 0.7% to 2.8% for sample with x = 0.05 mol In, while a further increase in the dopant concentration led to a decrease in the content of this phase in doped samples. In the case of samples with x = 0.15 and x = 0.20 mol In, the presence of tetragonal SnO_2 was also confirmed, whose content was 1.2% and 2.0%, respectively. Doping with indium led to an increase in the unit cell parameter (a), indicating that In(III) was incorporated into the Sn(IV) sites in the $BaSnO_3$ lattice. Microstructural analysis of the BSIO ceramic samples was performed using field emission scanning electron microscopy (FESEM) and confirmed the presence of submicron-sized grains in all samples, ranging from 200 nm to almost 1 μm for the undoped sample, and from 100 nm to 0.5 μm for the doped samples.

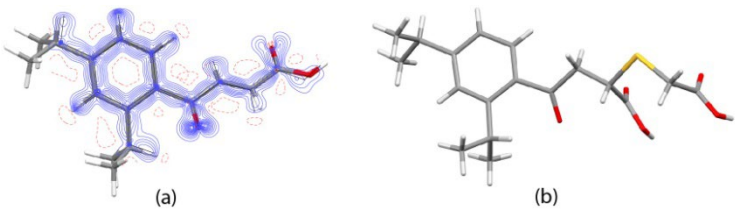
[1] H. Guo, A. Baker, J. Guo, C. A. Randall, *ACS Nano*, **10** (2016) 10606−10614.

СТРУКТУРНЕ КАРАКТЕРИСТИКЕ И КАРАКТЕРИСТИКЕ ГУСТИНЕ НАЕЛЕКТРИСАЊА *α,β*-НЕЗАСИЋЕНЕ КЕТО КИСЕЛИНЕ

Слађана Новаковић [a] https://orcid.org/0000-0002-8737-5870,
Андреј Дедић [a] https://orcid.org/0009-0005-8723-1243,
Иван Јуранић [b] https://orcid.org/0000-0003-1049-9725,
Горан Богдановић [a] https://orcid.org/0000-0002-4721-794X

[a] *Институт за нуклеарне науке Винча - Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Београд, Србија;* [b]*Институт за хемију, технологију и металургију, Универзитет у Београду, Београд, Србија*
e-mail: snovak@vin.bg.ac.rs

Једињења која садрже *α,β*-незасићени карбонилни (кетовинилни) фрагмент показују широк спектар биолошких активности и привлаче значајну пажњу у савременом дизајну лекова. У овом раду, представљамо резултате анализе расподеле густине наелектрисања деривата бензоилакрилне киселине (слика 1а), засноване на подацима добијеним дифракцијом рендгенског зрачења високе резолуције (100K). Фокус анализе је на електростатичким својствима кетовинилног фрагмента који представља језгро реактивности и биоактивности ових Мајклових акцептора. Због присуства различитих функционалних група, молекул формира бројне нековалентне интеракције. Специфичности густине наелектрисања унутар молекула, као и услед његових интеракција у кристалу, анализиране су са аспекта деформационе електронске густине, електростатичког потенцијала и квантне теорије атома у молекулу. Подложност молекула Мајкловој адицији приказана је анализом кристалне структуре његовог адукта са тиогликолном киселином (слика 1б). Кристалне структуре два молекула су употребљене за испитивање могуће аналогије нековалентних интеракција у кристалном и протеинском окружењу.



Слика 1. *α,β*-незасићена кето киселина (а) и њен адукт са тиогликолном киселином (б).

[1] B. J. Drakulić, T. P. Stanojković, Ž. S. Žižak, M. M. Dabović, *Eur. J. Med. Chem*. **46** (2011) 3265–3273.

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

STRUCTURAL AND CHARGE DENSITY FEATURES OF AN *α,β*-UNSATURATED CARBONYL ACID

Slađana Novaković [a] https://orcid.org/0000-0002,-8737-5870
Andrej Dedić [a] https://orcid.org/0009-0005-8723-1243,
Ivan Juranić [b] https://orcid.org/0000-0003-1049-9725,
Goran Bogdanović [a] https://orcid.org/0000-0002-4721-794X

[a] *VINČA Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia;* [b] *Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*
e-mail: snovak@vin.bg.ac.rs

Compounds containing the *α,β*-unsaturated carbonyl (ketovinyl) moiety display a broad spectrum of biological activities and attract substantial interest in modern drug design. In the present study, we report an experimental charge-density analysis of a bioactive benzoylacrylic acid derivative based on high-resolution X-ray diffraction data collected at 100 K (Figure 1a). The analysis focuses on the electrostatic properties of the ketovinyl moiety, which represents the core of the reactivity and bioactivity of these Michael acceptors. Owing to the presence of diverse functional groups, the molecule is also capable of forming a variety of noncovalent interactions. The charge density features of the molecule, as well as the intermolecular interactions within the crystal packing, were analyzed in terms of electron density distribution, electrostatic potential, and the quantum theory of atoms in molecules. The susceptibility of this molecule towards Michael addition was further demonstrated by the crystal structure of its adduct with thioglicolic acid (Figure 1b). The crystal structures of both molecules were employed to examine a possible analogy of their noncovalent interactions in the crystal and protein environments.

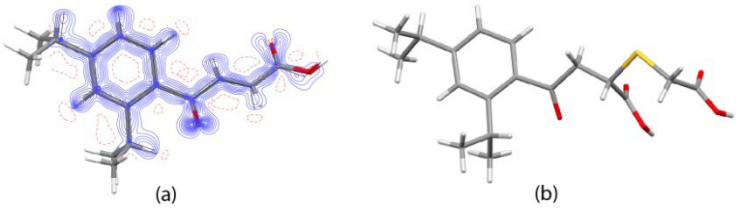


Figure 1. *α,β*-Unsaturated carbonyl acid (a) and its adduct with thioglicolic acid (b).

[1] B. J. Drakulić, T. P. Stanojković, Ž. S. Žižak, M. M. Dabović, *Eur. J. Med. Chem.* **46** (2011) 3265–3273.

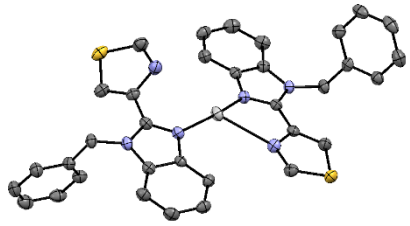
Acknowledgement: Authors gratefully acknowledges the support of the Ministry of Education, Science and Technological Development of the Republic of Serbia.

КРИСТАЛНА СТРУКТУРА СРЕБРО(I) КОМПЛЕКСА СА *N*-БЕНЗИЛТИАБЕНДАЗОЛОМ

Бојана В. Пантовић [a] https://orcid.org/0000-0003-1997-625X,
Тина П. Андрејевић [a] https://orcid.org/0000-0002-9537-5926,
Марта Почкај [b] https://orcid.org/0000-0002-6306-1631,
Виолета Р. Марковић [a] https://orcid.org/0000-0001-5561-0672,
Дарко П. Ашанин [c] https://orcid.org/0000-0003-1098-400X,
Невена Љ. Стевановић [a] https://orcid.org/0000-0003-3261-478X,
Биљана Ђ. Глишић [a] https://orcid.org/0000-0002-6343-8611

[a] *Универзитет у Крагујевцу, Природно-математички факултет, Радоја Домановића 12, 34000 Крагујевац, Србија;* [b] *Универзитет у Љубљани, Факултет за хемију и хемијску технологију, Večna pot 113, SI-1000, Љубљана, Словенија;*
[c] *Институт за информационе технологије, Лицеја Кнежевине Србије 1А, 34000 Крагујевац, Србија*
e-mail: bojana.pantovic@pmf.kg.ac.rs

У овом раду приказан је нов мононуклеарни комплекс сребра(I), [Ag(*N*-BzTBZ)$_2$]$BF_4 \cdot CH_3CN$, који је добијен у реакцији $AgBF_4$ са еквимоларном количином *N*-бензилтиабендазола (*N*-BzTBZ) у етанолу на собној температури, уз прекристализацију у ацетонитрилу. Добијени сребро(I) комплекс је окарактерисан помоћу спектроскопских (IR, ^{1}H и ^{13}C NMR, UV-Vis) и електрохемијских (CV) метода, док је његова кристална структура одређена применом рендгенске структурне анализе. У синтетисаном комплексу, [Ag(*N*-BzTBZ)$_2$]$^+$ катјон поседује дисторговану тригонално-планарну геометрију. Координациону сферу сребро(I) јона чине два *N*-BzTBZ лиганда, од којих је један бидентатно координован, док се други монодентатно координује преко бензимидазоловог атома азота. У кристалној решетки присутан је BF_4^- као контра-анјон, који обезбеђује електронеутралност комплекса.



Кристална структура [Ag(*N*-BzTBZ)$_2$]$^+$ катјона синтетисаног комплекса. Термални елипсоиди приказани су са 50% вероватноће.

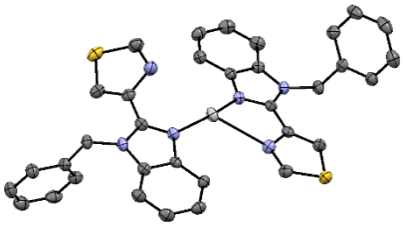
Захвалница: Ово истраживање је подржано од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Уговор бр. 451-03-34/2026-03/200122, 451-03-33/2026-03/200122 и 451-03-33/2026-03/200378) и Словеначке истраживачке агенције (P1-0175 і I0-0022).

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

Bojana V. Pantović [a] https://orcid.org/0000-0003-1997-625X,
Tina P. Andrejević [a] https://orcid.org/0000-0002-9537-5926,
Marta Počkaj [b] https://orcid.org/0000-0002-6306-1631,
Violeta R. Marković [a] https://orcid.org/0000-0001-5561-0672,
Darko P. Ašanin [c] https://orcid.org/0000-0003-1098-400X,
Nevena Lj. Stevanović [a] https://orcid.org/0000-0003-3261-478X,
Biljana Đ. Glišić [a] https://orcid.org/0000-0002-6343-8611

[a] *University of Kragujevac, Faculty of Science, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia;* [b] *University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Večna pot 113, SI-1000, Ljubljana, Slovenia;* [c] *Institute for Information Technologies, Liceja Kneževine Srbije 1A, 34000 Kragujevac, Serbia*
e-mail: bojana.pantovic@pmf.kg.ac.rs

In this work, a novel mononuclear silver(I) complex, $[Ag(N\text{-BzTBZ})_2]BF_4 \cdot CH_3CN$, was synthesized by reacting $AgBF_4$ with an equimolar amount of *N*-benzylthiabendazole (*N*-BzTBZ) in ethanol at room temperature, followed by recrystallization from acetonitrile. The obtained silver(I) complex was characterized by spectroscopic (IR, ^1H and ^{13}C NMR, UV-Vis) and electrochemical (CV) methods, while its crystal structure was determined by single-crystal X-ray diffraction analysis. In the synthesized complex, the $[Ag(N\text{-BzTBZ})_2]^+$ cation exhibits a distorted trigonal planar geometry. The coordination sphere of the silver(I) ion consists of two *N*-BzTBZ ligands, one acting as a bidentate ligand, while the other coordinates in a monodentate manner *via* the benzimidazole nitrogen atom. In the crystal lattice, BF_4^- is present as a counterion, ensuring the electroneutrality of the complex.



Crystal structure of the $[Ag(N\text{-BzTBZ})_2]^+$ cation of the synthesized complex. Thermal ellipsoids are drawn at the 50% probability level.

Acknowledgement: This research was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Agreements No. 451-03-34/2026-03/200122, 451-03-33/2026-03/200122 and 451-03-33/2026-03/200378), as well as the Slovenian Research and Innovation Agency (ARIS) under grants P1-0175 and I0-0022.

КРИСТАЛНА СТРУКТУРА НИКЛ(II) КОМПЛЕКСА СА 2-ХИДРОКСИ-1,3-ПРОПАНДИАМИН-*N,N,N',N'*-ТЕТРААЦЕТАТОМ

Бојана В. Пантовић [a] https://orcid.org/0000-0003-1997-625X,
Дарко П. Ашанин [b] https://orcid.org/0000-0003-1098-400X,
Тина П. Андрејевић [a] https://orcid.org/0000-0002-9537-5926,
Невена Љ. Стевановић [a] https://orcid.org/0000-0003-3261-478X,
Ненад С. Драшковић [c] https://orcid.org/0000-0002-3455-1033,
Милош И. Ђуран [d] https://orcid.org/0000-0003-3261-478X,
Биљана Ђ. Глишић [a] https://orcid.org/0000-0003-2763-2852

[a] *Универзитет у Крагујевцу, Природно-математички факултет, Радоја Домановића 12, 34000 Крагујевац, Србија;* [b] *Универзитет у Крагујевцу, Институт за информационе технологије Крагујевац, Лиџеја Кнежевине Србије 1А, 34000 Крагујевац, Србија;* [c] *Универзитет у Приштини-Косовска Митровица, Пољопривредни факултет, Копаоничка бб, 38228 Лешак, Србија;* [d] *Српска академија наука и уметности, Кнез Михаилова 35, 11000 Београд, Србија*
e-mail: bojana.pantovic@pmf.kg.ac.rs

Диаминополикарбоксилатни 2-OH-1,3-pdta^{4-} анјон (2-хидрокси-1,3-пропандиамин-*N,N,N',N'*-тетраацетат) претходно је коришћен за синтезу кобалт(III) и паладијум(II) комплекса [1,2]. У овом раду, 2-OH-1,3-pdta^{4-} је употребљен за синтезу новог никл(II) комплекса формуле $[Mg(H_2O)_6][Ni(2\text{-OH-}1,3\text{-pdta})]\cdot 2H_2O$. Добијени комплекс је окарактерисан помоћу IR спектроскопије, UV-Vis спектрофотометрије и рендгенске структурне анализе. Рендгенска структурна анализа је показала да је 2-OH-1,3-pdta^{4-} лиганд хексадентатно координован за Ni(II) јон преко два атома азота и четити атома кисеоника карбоксилатних група. Комплекс има октаедарску геометрију, кристалише у орторомбичној просторној групи *Pnna*, са параметрима јединичне ћелије: a = 13,4913(4) Å, b = 11,5579(3) Å, c = 13,8249(4) Å, α = 90°, β = 90°, γ = 90°, V = 2155,73 Å^3, Z = 2, R_{int} = 7,2%.

[1] X.-M. Chen, H.-A. Chen, B.-M. Wu, T. C. W. Mak, *Acta Crystallographica Section C*, **52** (1996) 2693–2695.
[2] R.-F Song, C.-Z. Zhang, F. Li, S.-C. Jin, Z.-S. Jin, *Chemical Research in Chinese Universities*, **8** (1992) 399–404.

Захвалница: Ово истраживање је финансијски подржано од стране Министарства за науку, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Уговори бр. 451-03-34/2026-03/200122, 451-03-33/2026-03/200122, и 451-03-33/2026-03/200378) и стратешког пројекта Српске академије наука и уметности бр. 01-2026.

CRYSTAL STRUCTURE OF A NICKEL(II) COMPLEX WITH 2-HYDROXY-1,3-PROPANEDIAMINE-*N,N,N',N'*-TETRAACETATE

Bojana V. Pantović [a] https://orcid.org/0000-0003-1997-625X,
Darko P. Ašanin [b] https://orcid.org/0000-0003-1098-400X,
Tina P. Andrejević [a] https://orcid.org/0000-0002-9537-5926,
Nevena Lj. Stevanović [a] https://orcid.org/0000-0003-3261-478X,
Nenad S. Drašković [c] https://orcid.org/0000-0002-3455-1033,
Miloš I. Djuran [d] https://orcid.org/0000-0003-3261-478X,
Biljana Đ. Glišić [a] https://orcid.org/0000-0002-6343-8611

[a] *University of Kragujevac, Faculty of Science, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia;* [b] *University of Kragujevac, Institute for Information Technologies Kragujevac, Liceja Kneževine Srbije 1A, 34000 Kragujevac, Serbia;* [c] *University of Priština-Kosovska Mitrovica, Faculty of Agriculture, Kopaonička bb, 38228 Lešak, Serbia;* [d] *Serbian Academy of Sciences and Arts, Knez Mihailova 35, 11000 Belgrade, Serbia*
e-mail: bojana.pantovic@pmf.kg.ac.rs

Diaminopolycarboxylate 2-OH-1,3-pdta^{4-} anion (2-hydroxy-1,3-propanediamine-*N,N,N',N'*-tetraacetate) has previously been used for the synthesis of cobalt(III) and palladium(II) complexes [1,2]. In this work, 2-OH-1,3-pdta^{4-} was employed for the synthesis of a new nickel(II) complex with the formula $[Mg(H_2O)_6][Ni(2\text{-OH-}1,3\text{-pdta})]\cdot 2H_2O$. The obtained complex was characterized using IR spectroscopy, UV-Vis spectrophotometry, and single-crystal X-ray diffraction analysis. X-ray analysis revealed that 2-OH-1,3-pdta^{4-} ligand coordinates to the Ni(II) ion in a hexadentate manner *via* two nitrogen atoms and four oxygen atoms from carboxylate groups. The complex exhibits an octahedral geometry and crystallizes in the orthorhombic space group *Pnna*, with the following unit-cell parameters: a = 13.4913(4) Å, b = 11.5579(3) Å, c = 13.8249(4) Å, α = 90°, β = 90°, γ = 90°, V = 2155.73 Å^3, Z = 2, R_{int} = 7.2%.

[1] X.-M. Chen, H.-A. Chen, B.-M. Wu, T. C. W. Mak, *Acta Crystallographica Section C*, **52** (1996) 2693–2695.
[2] R.-F Song, C.-Z. Zhang, F. Li, S.-C. Jin, Z.-S. Jin, *Chemical Research in Chinese Universities*, **8** (1992) 399–404.

Acknowledgement: This research was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (No. 451-03-34/2026-03/200122, 451-03-33/2026-03/200122, and 451-03-33/2026-03/200378), and from the Serbian Academy of Sciences and Arts under the strategic projects program, with grant agreement No. 01-2026.

СИНТЕЗА И СТРУКТУРНА КАРАКТЕРИЗАЦИЈА ДИНУКЛЕАРНОГ АЗИДО-ПРЕМОШЋЕНОГ КОМПЛЕКСА НИКЛА(II) СА 2-АЦЕТИЛТИАЗОЛ СЕМИКАРБАЗОНОМ

Марија Павловић [a] https://orcid.org/0009-0003-5198-3713,
Мима Јевтовић [a] https://orcid.org/0000-0001-6039-5452,
Маја Шумар Ристовић [b] https://orcid.org/0000-0002-2733-8955,
Божидар Чобељић [b] https://orcid.org/0000-0001-6335-0196

[a] *Иновациони центар Хемијског факултета д.о.о, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија;* [b] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија*
e-mail: mpavlovic@chem.bg.ac.rs

Кондензационом реакцијом семикарбазида-хидрохлорида и 2-ацетилтиазола добијен је тридентатни лиганд (*E*)-2-(1-(тиазол-2-ил)етилиден)хидразин-1--карбоксамид (H**L**), који је потом употребљен за синтезу Ni(II) комплекса у вишку азида у базној средини (pH = 8-9). Добијени комплекс $[Ni_2(H\mathbf{L})_2(N_3)_4] \cdot H_2O$ окарактерисан је ИЦ спектроскопијом и рендгенском структурном анализом. На основу података рендгенске структурне анализе утврђено је да комплекс кристалише у моноклиничном кристалном систему и припада $P2_1/c$ просторној групи. Централни метални јони Ni(II) налазе се у дисторгованом октаедарском координационом окружењу, 2-ацетилтиазол семикарбазонски лиганд се тридентатно координује преко NNO донорског сета атома: тиазолног и азометинског азота и карбонилног кисеоника, док преостала три координациона места заузимају азидо лиганади. Један азидо лиганд се координује терминално, док преостала два остварују end-on (μ-1,1) координацију и повезују металне центре. Комплекс у спољашњој сфери садржи молекул воде.

Захвалница: Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије, Евиденциони бројеви: 451-03-33/2026-03/200288 и 451-03-33/2026-03/ 200168

SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF A DINUCLEAR AZIDO-BRIDGED NICKEL(II) COMPLEX WITH 2-ACETYLTHIAZOLE SEMICARBAZONE

Marija Pavlović [a] https://orcid.org/0009-0003-5198-3713,
Mima Jevtović [a] https://orcid.org/0000-0001-6039-5452,
Maja Šumar Ristović [b] https://orcid.org/0000-0002-2733-8955,
Božidar Čobeljić [b] https://orcid.org/0000-0001-6335-0196

[a] *Innovative Centre of the Faculty of Chemistry ltd, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia;* [b] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia*
e-mail: mpavlovic@chem.bg.ac.rs

The tridentate ligand (*E*)-2-(1-(thiazol-2-yl)ethylidene)hydrazine-1-carboxamide (H**L**) was synthesized by the condensation reaction of semicarbazide hydrochloride and 2-acetylthiazole and subsequently used for the preparation of a Ni(II) complex in the presence of an excess of azide ions under basic conditions (pH = 8–9). The obtained complex $[Ni_2(H\mathbf{L})_2(N_3)_4] \cdot H_2O$ was characterized by IR spectroscopy and single-crystal X-ray diffraction analysis. Crystallographic analysis revealed that the complex crystallizes in the monoclinic crystal system with space group $P2_1/c$. Each Ni(II) center exhibits a distorted octahedral coordination environment formed by the tridentate coordination of the 2-acetylthiazole semicarbazone ligand through the thiazole nitrogen, azomethine nitrogen, and carbonyl oxygen atoms, generating an NNO donor set. The remaining coordination sites are occupied by azido ligands, one of which is terminally coordinated, while the other two adopt an end-on (μ-1,1) bridging coordination mode linking the metal centers. One water molecule is present in the outer coordination sphere of the complex.

Acknowledgement: Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia, Contract numbers: 451-03-33/2026-03/200288 and 451-03-33/2026-03/200168

СТРУКТУРНА АНАЛИЗА МИКРО- И НАНО-$SrTiO_3$ ПРАХОВА И ЊИХОВА УЛОГА У ПОЛИМЕРНИМ КОМПОЗИТИМА

Биљана Пећанин [a] https://orcid.org/0009-0008-2196-8703,
Славица Малетић [b] https://orcid.org/0000-0001-8516-7245,
Наташа Јовић Орсини [c] https://orcid.org/0000-0003-1613-3361,
Драгана Грујић [a,d] https://orcid.org/0000-0002-1359-8748,
Бранка Ружичић [a] https://orcid.org/0000-0002-7599-1625,
Мања Куречич [e] https://orcid.org/0000-0003-2029-5128,
Ален Ерјавец [e] https://orcid.org/0009-0004-9077-9712,
Бланка Шкипина [a] https://orcid.org/0000-0002-5170-9090

[a] *Универзитет у Бањој Луци, Технолошки факултет, Бања Лука, Босна и Херцеговина;* [b] *Универзитет у Београду-Физички факултет, Београд, Србија;* [c] *Институт за нуклеарне науке Винча - Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Винча, Београд, Србија;* [d] *Академија наука и умјетности Републике Српске, Бања Лука, Босна и Херцеговина;* [e] *Универзитет у Марибору, Машински факултет, Марибор, Словенија*
e-mail: biljana.pecanin@tf.unibl.org

У овом раду се испитују структурне и морфолошке карактеристике микро- и наночестица стронцијум-титаната ($SrTiO_3$), као и начин на који те карактеристике утичу на својства полимерних композита са матрицом од полиетилена ниске густине (LDPE). Оба праха показују кубну перовскитну структуру (просторна група $Pm\bar{3}m$). Наночестице $SrTiO_3$ садрже мању секундарну фазу стронцијум карбоната ($SrCO_3$), што се приписује побољшаној површинској реактивности и адсорпцији CO_2. Ритвелдова анализа открива да су структурне карактеристике зависне од величине честице. Наночестице показују нешто већи параметар решетке (3,9094 Å наспрам 3,9067 Å), смањење просјечне величине кристалита (са ~80 nm на ~30 nm) и микронапрезање (~0,15%). Анализа скенирајућом електронском микроскопијом (SEM) показује различите расподјеле величине честица и морфологију за микро- и нанопрах $SrTiO_3$. Поред тога, наночестице су показале изражену тенденцију формирања сферних агломерата. Карактеризација LDPE/$SrTiO_3$ композита дифракцијом X-зрака (XRD) и инфрацрвеном спектроскопијом са Фуријеовом трансформацијом (FTIR) потврђује да матрица полиетилена ниске густине остаје структурно непромијењена. Промјене у вибрационом спектру композита које се односе на вибрације стронцијум-титаната указују на међуфазне интеракције које су зависне од величине честица и израженије су код нанокомпозита. SEM снимци попречног пресјека композита показују равномјерну расподјелу микрочестица $SrTiO_3$ и сферних агломерата наночестица $SrTiO_3$. Морфологија композита се разликује због изражене тенденције наночестица ка агломерацији. Ово може утицати на својства композита, као и на структурне и морфолошке карактеристике $SrTiO_3$ праха.

STRUCTURAL INSIGHTS INTO MICRO- AND NANO-$SrTiO_3$ POWDERS AND THEIR ROLE AS FILLERS IN POLYMER COMPOSITES

Biljana Pećanin [a] https://orcid.org/0009-0008-2196-8703,
Slavica Maletić [b] https://orcid.org/0000-0001-8516-7245,
Nataša Jović Orsini [c] https://orcid.org/0000-0003-1613-3361,
Dragana Grujić [a,d] https://orcid.org/0000-0002-1359-8748,
Branka Ružičić [a] https://orcid.org/0000-0002-7599-1625,
Manja Kurečič [e] https://orcid.org/0000-0003-2029-5128,
Alen Erjavec [e] https://orcid.org/0009-0004-9077-9712,
Blanka Škipina [a] https://orcid.org/0000-0002-5170-9090

[a] *University of Banja Luka, Faculty of Technology, Banja Luka, Bosnia and Herzegovina;* [b] *University of Belgrade-Faculty of Physics, Belgrade, Serbia;* [c] *Vinča Institute of Nuclear Sciences–National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia;* [d] *Academy of Sciences and Arts of the Republic of Srpska, Banja Luka, Bosnia and Herzegovina;* [e] *University of Maribor, Faculty of Mechanical Engineering, Maribor, Slovenia*
e-mail: biljana.pecanin@tf.unibl.org

This study investigates the structural and morphological characteristics of micro- and nano-sized strontium titanate ($SrTiO_3$), and how these characteristics influence the properties of polymer composites based on low-density polyethylene (LDPE) matrix. Both powders exhibit a cubic perovskite structure (space group $Pm\bar{3}m$). Nano-sized $SrTiO_3$ contains a minor secondary strontium carbonate ($SrCO_3$) phase due to its enhanced surface reactivity and CO_2 adsorption. Rietveld refinement of the X-ray diffraction data reveals size-dependent structural effects. The nano-sized sample shows a slightly expanded lattice parameter (3.9094 Å vs. 3.9067 Å), a reduction in the average crystallite size (from ~80 nm to ~30 nm) and the detection of microstrain (~0.15%). Analysis using scanning electron microscopy (SEM) revealed different particle size distributions and morphologies for micro- and nano-sized $SrTiO_3$ powders. In addition, the nanoparticles showed a pronounced tendency to agglomerate into spheres. X-ray diffraction (XRD) and Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) analyses of the LDPE/$SrTiO_3$ composites confirmed that the polymer matrix remains structurally unchanged. Shifts in the vibrational band associated with $SrTiO_3$ indicated size-dependent interfacial interactions, more pronounced in nanocomposites. The cross-sectional SEM images of composites revealed uniform dispersion of both micro-$SrTiO_3$ and spherical agglomerates of nano-$SrTiO_3$ particles. The morphology of the composites differs due to the strong tendency of the nanoparticles to agglomerate. This can affect their properties, as well as the structural and morphological characteristics of the $SrTiO_3$ powder.

PODEŠAVANJE KATALITIČKIH SVOJSTAVA RENIJUM(V)-KOMPLEKSA STRUKTURNOM MODIFIKCIJOM LIGANADA

Tamara A. Petrović [a] http://orcid.org/0000-0003-1818-8710,
Ana Kandić [b] http://orcid.org/0009-0002-4709-5628,
Jana Timotijević [a] https://orcid.org/0009-0001-3602-3955,
Ljiljana E. Mihajlović [b] https://orcid.org/0000-0003-4802-432X,
Stefan R. Nikolić [b] http://orcid.org/0000-0002-0164-134X,
Antoine Dupé [c] https://orcid.org/0000-0001-7781-0771,
Jelena M. Poljarević [a] http://orcid.org/0000-0002-6706-0281

[a] *Univerzitet u Beogradu - Hemijski fakultet, Beograd, Srbija,* [b] *Inovacioni centar Hemijskog fakulteta u Beogradu, Beograd, Srbija,* [c] *Iinstitut za hemiju, Univerzitet u Gracu, Grac, Austrija*
tamarap@chem.bg.ac.rs

Oksorenijum(V) kompleksi privukli su značajnu pažnju kao homogeni katalizatori u reakcijama epoksidacije olefina [1]. U ovom radu ispitivan je uticaj strukturnih modifikacija derivata 2-pikolinske kiseline na katalitičku aktivnost pet Re(V) kompleksa sa derivatima pikolinske kiseline u reakciji epoksidacije ciklooktena, uz *terc*-butil hidroperoksid kao oksidaciono sredstvo. Svi ispitivani kompleksi pokazali su trenutnu katalitičku aktivnost bez uočljivog indukcionog perioda, pri čemu je najveći deo konverzije ciklooktena ostvaren tokom prva tri sata reakcije. Među ispitivanim jedinjenjima, kompleks sa 6-hloropiridin-2-karboksilnom kiselinom pokazao je najbolju katalitičku aktivnost, dostižući konverziju ciklooktena od 85%. Monokristali pogodni za rendgensku strukturnu analizu dobijeni su za tri oksorenijum(V) kompleksa sa odgovarajućim derivatima pikolinske kiseline: 6-fluoropiridin-2-karboksilnom kiselinom (**L1**), 6-hloropiridin-2-karboksilnom kiselinom **(L2**) i 5-hidroksipiridin-2-karboksilnom kiselinom (**L3**). Strukturna analiza pokazala je da se pikolinati kao ligandi koordinuju za centralni atom renijuma bidentatno, preko atoma azota piridinskog prstena i jednog atoma kiseonika karboksilne grupe, gradeći oko metalnog centra deformisanu oktaedarsku geometriju. Takođe, utvrđeno je da kompleks **3** kokristališe sa molekulom trifenilfosfin-oksida.

[1] J. A. Schachner, B. Berner, F. Belaj, N. C. Mösch-Zanetti, *Dalton Trans.*, **48** (2019) 8106.

Zahvalnica: Ovaj rad je finansiran od strane Ministarstva nauke, tehnološkog razvoja i inovacija Republike Srbije (451-03-33/2026-03/200168, 451-03-33/2026-03/200288) i programa Evropske unije Horizon Europe u okviru Marie Skłodowska-Curie Actions grant ugovora br. 101086373.

MODULATING RHENIUM(V) CATALYSTS THROUGH LIGAND STRUCTURAL MODIFICATIONS

Tamara A. Petrović [a] http://orcid.org/0000-0003-1818-8710,
Ana Kandić [b] http://orcid.org/0009-0002-4709-5628,
Jana Timotijević [a] https://orcid.org/0009-0001-3602-3955,
Ljiljana E. Mihajlović [b] https://orcid.org/0000-0003-4802-432X,
Stefan R. Nikolić [b] http://orcid.org/0000-0002-0164-134X,
Antoine Dupé [c] https://orcid.org/0000-0001-7781-0771,
Jelena M. Poljarević [a] http://orcid.org/0000-0002-6706-0281

[a] *University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia,* [b] *Innovation Center of the Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia,* [c] *Institute of Chemistry, University of Graz, Graz, Austria*
tamarap@chem.bg.ac.rs

Over the past decade, oxorhenium(V) complexes have attracted considerable attention as homogeneous catalysts for olefin epoxidation [1]. In this study, we examined how structural variations in 2-picolinic acid derivatives affect the catalytic performance of five picolinate-based Re(V) complexes for the epoxidation of cyclooctene using *tert*-butyl hydroperoxide as the oxidant. All investigated complexes exhibited immediate catalytic activity without an observable induction period, and the majority of cyclooctene conversion occurred within the first three hours of the reaction. Among the tested complexes, the compound incorporating 6-chloropyridine-2-carboxylic acid demonstrated the best catalytic performance, reaching a cyclooctene conversion of 85%. Single crystals suitable for X-ray diffraction analysis were successfully obtained for three oxorhenium(V) complexes containing the corresponding picolinate ligands: 6-fluoropyridine-2-carboxylic acid (**L1**), 6-chloropyridine-2-carboxylic acid (**L2**), and 5-hydroxypyridine-2-carboxylic acid (**L3**). Structural analysis revealed that the picolinate ligands coordinate to the rhenium center in a bidentate manner through the pyridine nitrogen atom and one oxygen atom of the carboxylate group, resulting in a distorted octahedral geometry around the metal center. In addition, complex **3** was found to co-crystallize with a triphenylphosphine oxide molecule.

[1] J. A. Schachner, B. Berner, F. Belaj, N. C. Mösch-Zanetti, *Dalton Trans.*, **48** (2019) 8106.

Acknowledgments: This work was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia (451-03-33/2026-03/200168, 451-03-33/2026-03/200288) and the European Union's Horizon Europe program under the Marie Skłodowska-Curie Actions grant agreement No. 101086373.

СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА Ni(II) СА ТЕТРАИМИНСКИМ ДЕРИВАТОМ 2,6-ДИАЦЕТИЛПИРИДИНА

Маријана С. Регојевић [a] https://orcid.org/0009-0005-7967-2073,
Милица Г. Богдановић [a] https://orcid.org/0000-0001-7122-6929,
Мирјана М. Радановић [a] https://orcid.org/0000-0001-6675-9763.

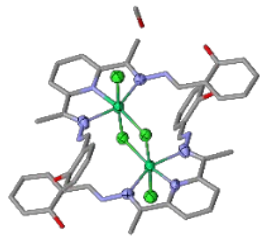
[a] *Природно-математички факултет Нови Сад, Трг Доситеја Обрадовића 3, Нови Сад, Србија*
e-mail: mirjana.lalovic@dh.uns.ac.rs

Шифове базе представљају класу органских једињења познату по биолошкој активности и израженим координационим способностима. Ова једињења се лако формирају *in situ* и често дају стабилне комплексе метала са разноврсним структурним карактеристикама.

У овом раду синтетисан је Ni(II) комплекс са *in situ* формираним тетраиминским лигандом (L), који је добијен из бис(хидразина) 2,6-диацетилпиридина (DAPB) и салицилалдехида. Реакцијом $NiCl_2$ у метанолу (моларни однос 1:1:2) добијени су монокристали једињења $[Ni_2(\mu\text{-}Cl)_2LCl_2]\cdot MeOH$.

Структурна анализа је показала да је су два Ni(II) центра повезана мостовним хлоридним лигандима, и да су координовани с по једним молекулом тридентатног тетраиминског лиганда. Поред терминалних хлоридних лиганада, присуство два хлоридна моста доводи до формирања Ni_2Cl_2 четворочланог биметалног прстена, који стабилизује динуклеарну структуру. Посебно је значајно да овај тип динуклеарног мотива до сада није био описан за ову класу тетраиминских лиганада добијених из 2,6-диацетилпиридина. Молекулска структура комплекса приказана је на слици 1.

Кристалографски подаци: моноклинични кристални систем, $P2_1/c$, a = 13,7390(12), b = 8,7153(6), c = 21,2084(19), β = 97,121(9)°, V = 2519,9(4) Å^3, Z = 2. Утачњавање базирано на F^2 (332 параметара): R1 = 0,088, wR2 = 0,198, S = 0,96.



Слика 1. Молекулска структура комплекса $[Ni_2(\mu\text{-}Cl)_2LCl_2]\cdot MeOH$ (атоми водоника су изостављени због прегледности)

Захвалница: Истраживања је финансирао Покрајински секретаријат за високо образовање и научноистраживачку делатност (Ев. бр. пројекта 003864137 2025 09418 003 000 000 001 04 004).

STRUCTURE OF A NOVEL Ni(II) COMPLEX WITH A TETRAIMINE DERIVATIVE OF 2,6-DIACETYLPYRIDINE

Marijana S. Regojević [a] https://orcid.org/0009-0005-7967-2073,
Milica G. Bogdanović [a] https://orcid.org/0000-0001-7122-6929,
Mirjana M. Radanović [a] https://orcid.org/0000-0001-6675-9763

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

Schiff bases are a class of organic compounds known for their biological relevance and strong coordination ability toward transition metal ions. They are readily formed *in situ* and often yield stable metal complexes with diverse structural features.

In this work, a Ni(II) complex with an *in situ* formed tetraimine ligand (L) derived from 2,6-diacetylpyridine-bis(hydrazine) (DAPB) and salicylaldehyde was obtained. The reaction with $NiCl_2$ in methanol (1:1:2) afforded single crystals of the compound $[Ni_2(\mu\text{-}Cl)_2LCl_2]\cdot MeOH$.

Single-crystal X-ray diffraction analysis revealed a dinuclear structure in which chloride ligands bridge two Ni(II) centers. Each metal center is coordinated by a tridentate tetraimine ligand *via* the pyridine and two azomethine nitrogen atoms, forming two five-membered chelate rings. In addition, the presence of two μ-chloride bridges results in the formation of a Ni_2Cl_2 four-membered bimetallocycle, which stabilizes the dinuclear architecture. Notably, this represents a previously unreported dinuclear motif for this class of tetraimine ligands derived from 2,6-diacetylpyridine. The molecular structure of the complex is shown in Figure 1.

Crystallographic data: monoclinic crystal system, $P2_1/c$; a = 13.7390(12), b = 8.7153(6), c = 21.2084(19), β = 97.121(9)°, V = 2519.9(4) Å^3, Z = 2. Refinement based on F^2 (332 parameters): R1 = 0.088, wR2 = 0.198, S = 0.96.

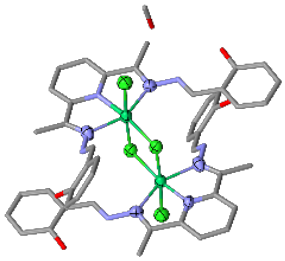


Figure 1. The molecular structure of the complex $[Ni_2(\mu\text{-}Cl)_2LCl_2]\cdot MeOH$ (hydrogen atoms are omitted for clarity)

Acknowledgement: The authors gratefully acknowledge the financial support of the Provincial Secretariat for Higher Education and Scientific Research (Grant No. 003864137 2025 09418 003 000 000 001 04 004).

ПФАС КАО ПОТЕНЦИЈАЛНИ МОДУЛАТОРИ ФУНКЦИЈЕ ХУМАНОГ ХЕМОГЛОБИНА

Александра Ђурђевић Ђелмаш [a] https://orcid.org/0000-0002-6951-4507,
Данило Трајковић [a] https://orcid.org/0009-0006-0729-1121,
Милица Радибратовић [b] https://orcid.org/0000-0003-4708-6633,
Јована Ракоњац [a] https://orcid.org/0009-0003-2956-9495,
Карла Милчић [b] https://orcid.org/0000-0002-3672-4575,
Милош Милчић [a] https://orcid.org/0000-0002-0082-5278

[a] *Универзитет у Београду–Хемијски факултет; Студентски трг 12-16, Београд, Србија;* [b]*Универзитет у Београду–Институт за хемију, технологију и металургију, Институт од националног значаја за Републику Србију, Његошева 12, Београд, Србија*
e-mail: milica.radibratovic@ihtm.bg.ac.rs

Пер- и полифлуороалкил супстанце (ПФАС) су синтетска једињења која садрже један или више алифатичних ланаца у којима су атоми водоника делимично или потпуно замењени атомима флуора. Услед способности везивања ПФАС за хумане протеине крви, показано је да могу утицати на њихову структуру и функцију, иако интеракције са хуманим хемоглобином још увек нису довољно разјашњене [1]. У овом раду испитане су интеракције ПФАС различите дужине ланца са хуманим хемоглобином применом теоријских и експерименталних метода. Резултати молекулског докинга перфлуороктанске киселине на кристалној структури тетрамерног хемоглобина указали су на присуство већег броја повољних везивних места локализованих између субјединица протеина, што је у сагласности са раније објављеним експерименталним резултатима који показују дисоцијацију једне субјединице и ослобађање хема након везивања ПФОА [2]. Поред тога, резултати докинга су указали на могућност везивања трифлуорсирћетне киселине у непосредној близини хема. DFT прорачуни интеракције ТФА са моделом хем–имидазол показали су могућност формирања стабилног октаедарског комплекса. Ипак, резултати молекулско-динамичких симулација указују да везивање ТФА у дисталном џепу хемоглобина није кинетички повољан процес. Добијени резултати доприносе бољем разумевању интеракције ПФАС са хуманим хемоглобином и њиховог потенцијалног утицаја на структуру и функцију овог протеина.

[1] H. Brunn, C. Arnold, A. Körner, J. Rippen, H. T. Steinhäuser, I. Wagner, *Environ. Sci. Eur.*, **35** (2023) 1–50.
[2] N. D. Perera, J. Betancourt, J. Miksovska, K. E. O'Shea, *Curr. Res. Toxicol.*, **5** (2023) 100130.

Захвалница: Ово истраживање је финансијски подржано од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Уговор бр. 451-03-33/2026-03/200026 и Уговор бр. 451-03-33/2026-03/ 200168).

PFAS AS POTENTIAL MODULATORS OF HUMAN HEMOGLOBIN FUNCTION

Aleksandra Đurđević Đelmaš [a] https://orcid.org/0000-0002-6951-4507,
Danilo Trajković [a] https://orcid.org/0009-0006-0729-1121,
Milica Radibratović [b] https://orcid.org/0000-0003-4708-6633,
Jovana Rakonjac [a] https://orcid.org/0009-0003-2956-9495,
Karla Milčić [b] https://orcid.org/0000-0002-3672-4575,
Miloš Milčić [a] https://orcid.org/0000-0002-0082-5278

[a] *Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia;* [b] *University of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia*
e-mail: milica.radibratovic@ihtm.bg.ac.rs

Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) are synthetic compounds containing one or more aliphatic chains in which hydrogen atoms are partially or completely replaced by fluorine atoms. Their structure gives them a surface-active nature, while the extremely strong C–F bond makes these molecules thermostable and resistant to chemical and physical changes. Due to the ability of PFAS to bind to human blood proteins, it has been shown that they can affect their structure and function, although interactions with human hemoglobin are still not sufficiently elucidated [1]. In this work, the interactions of PFAS of different chain lengths with human hemoglobin were investigated using theoretical and experimental methods. The molecular docking results of perfluorooctanoic acid on the crystal structure of tetrameric hemoglobin revealed numerous favorable binding sites situated between the protein subunits, consistent with previously reported experimental findings that showed the dissociation of one subunit and the release of heme upon PFOA binding [2]. Moreover, docking data suggested the potential binding of trifluoroacetic acid in close proximity to heme. DFT studies of the interaction between TFA and the heme–imidazole model indicated the potential for a stable octahedral complex, with TFA occupying the site typically held by the oxygen molecule under physiological conditions. However, the results of molecular dynamics simulations indicate that the binding of TFA in the distal pocket of hemoglobin is not a kinetically favorable process. The obtained results contribute to a better understanding of the interaction of PFAS with human hemoglobin and their potential impact on the structure and function of this protein.

[1] H. Brunn, C. Arnold, A. Körner, J. Rippen, H. T. Steinhäuser, I. Wagner, *Environ. Sci. Eur.*, **35** (2023) 1–50.
[2] N. D. Perera, J. Betancourt, J. Miksovska, K. E. O'Shea, *Curr. Res. Toxicol.*, **5** (2023) 100130.

Acknowledgement: This research has been financially supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia (Contract No. 451-03-33/2026-03/200026 and Contract No. 451-03-33/2026-03/ 200168).

Cu(I)/Cu(II) КОМПЛЕКС СА 2,6-ДИАЦЕТИЛПИРИДИН-БИС(ФЕНИЛХИДРАЗОНОМ)

Маријана С. Регојевић [a] https://orcid.org/0009-0005-7967-2073,
Марко В. Родић [a] https://orcid.org/0000-0002-4471-8001,
Мирјана М. Радановић [a] https://orcid.org/0000-0001-6675-9763

[a] *Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Трг Доситеја Обрадовића 3, Нови Сад, Србија*
e-mail: marijana.kostic@dh.uns.ac.rs

Координациона хемија Шифових база представља значајну област истраживања већ дуги низ година. Иако су ова једињења предмет проучавања деценијама, интересовање за њих се не смањује, већ се додатно појачава у контексту савремених технологија и нових научних приступа [1]. У овом раду је описана синтеза и структурна карактеризација новог комплекса симетричне Шифове базе 2,6-диацетилпиридина и фенил-хидразина (L).

Црни призматични кристали новосинтетисаног једињења добијени су реакцијом $CuCl_2$ и L, у молском односу 5:1, у ацетону. Рендгенска структурна анализа потврдила је формирање мешовито-валентног комплекса бакра који садржи и Cu(I) и Cu(II) центре у оквиру комплексне јонске структуре.

Једињење показује добру растворљивост у метанолу, води и ДМФ-у, слабију у ацетонитрилу, док је нерастворно у етанолу и ацетону. Моларна проводљивост у ДМФ-у указује на присуство великог броја мобилних јона у раствору (170 S cm^2 mol^{-1}).

У структури новосинтетисаног комплекса присутна су три кристалографски независна комплексна јона. Један од њих се налази општем положају, а преостала два на специјалним положајима, на *C*2 осама симетрије. Применом симетријских операција добијају се комплетне молекулске јединице, што одређује распоред молекула и координационо окружење јона метала у кристалу. Асиметрична јединица овог комплекса се састоји од једног комплексног јона $[Cu^{II}(L)_2]^{2+}$ и јона $[Cu^{II}Cl_4]^{2-}$ и $[Cu^{I}Cl_2]^{-}$ на општим положајима, затим две половине катјона $[Cu^{II}(L)_2]^{2+}$, хлоридног јона као и молекула растварача на специјалним положајима дајући коначну формулу комплекса $[Cu^{II}(L)_2]_2[Cu^{II}Cl_4][Cu^{I}Cl_2]Cl{\cdot}Me_2CO$. Лиганд је у овом бис(лиганд) комплексу тридентатно N_3 координован преко пиридинског и фенилхидразинских донорних атома азота.

Кристалографски подаци: моноклинични кристални систем, *I*2/*a*, a = 31,750 (4), b = 22,4207 (17), c = 25,471 (3), β = 103,667(12)°, V = 17619(3) Å^3, Z = 12. Утачњавање базирано на F^2 (296 параметара): $R1$ = 0,039, $wR2$ = 0,141, S = 0,93.

[1] G. Behera, R. Sidhanty, A. K. Sutar, T. Maharana, *Discovery Chemistry*, **3** (2026) 146. https://doi.org/10.1007/s44371-026-00536-5

Захвалница: Истраживања је финансирало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Ев. бр. 451-03-33/2026-03/200125 и 451-03-34/2026-03/200125).

Cu(I)/Cu(II) MIXED-VALENCE COMPLEX WITH 2,6-DIACETYLPYRIDINE-BIS(PHENYLHYDRAZONE)

Marijana S. Regojević [a] https://orcid.org/0009-0005-7967-2073,
Marko V. Rodić [a] https://orcid.org/0000-0002-4471-8001,
Mirjana M. Radanović [a] https://orcid.org/0000-0001-6675-9763

[a] *Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 3, Novi Sad, Serbia*
e-mail: marijana.kostic@dh.uns.ac.rs

Coordination chemistry of Schiff bases has represented a significant field of research for many years. Although these compounds have been studied for decades, interest in them has not diminished; rather, it has further intensified in the context of modern technologies and new scientific approaches [1]. In this work, the synthesis and structural characterization of a new complex of a symmetric Schiff base derived from 2,6-diacetylpyridine and phenylhydrazine (L) are described.

Black prismatic crystals of the newly synthesized compound were obtained by the reaction of $CuCl_2$ and L in a 5:1 molar ratio in acetone. Single-crystal X-ray diffraction analysis confirmed the formation of a mixed-valence copper system containing both Cu(I) and Cu(II) centers within a complex ionic structure.

The compound exhibits good solubility in methanol, water, and DMF, moderate solubility in acetonitrile, and is insoluble in ethanol and acetone. Molar conductivity in DMF indicates the presence of a high concentration of mobile ions in solution (170 S cm^2 mol^{-1}).

The crystal structure contains three crystallographically independent complex ions. One is in a general position, while the other two are in special positions along the *C*2 symmetry axes. Application of symmetry operations generates the complete molecular units, defining the arrangement of molecules and the coordination environment of the metal ions in the crystal. The asymmetric unit of this complex consists of one complex cation $[Cu^{II}(L)_2]^{2+}$, $[Cu^{II}Cl_4]^{2-}$ and $[Cu^{I}Cl_2]^{-}$ ions located on general positions, as well as two halves of the $[Cu^{II}(L)_2]^{2+}$ cation, a chloride ion, and a solvent molecule located on special positions, giving the overall formula $[Cu^{II}(L)_2]_2[Cu^{II}Cl_4][Cu^{I}Cl_2]Cl{\cdot}Me_2CO$. In this bis(ligand) complex, the ligand acts as a tridentate N_3 donor, coordinating through the pyridine and phenylhydrazine nitrogen atoms.

Crystallographic data: monoclinic crystal system, *I*2/*a*; *a* = 31.750(4), *b* = 22.4207(17), *c* = 25.471(3) Å, *β* = 103.667(12)°, *V* = 17619(3) Å³, *Z* = 12. Refinement based on F^2 (296 parameters): *R*1 = 0.039, *wR*2 = 0.141, *S* = 0.93.

[1] G. Behera, R. Sidhanty, A. K. Sutar, T. Maharana, *Discovery Chemistry*, **3** (2026) 146. https://doi.org/10.1007/s44371-026-00536-5

Acknowledgement: The authors gratefully acknowledge the financial support of the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-33/2026-03/200125 & 451-03-34/2026-03/200125).

С-Н/О-М ИНТЕРАКЦИЈЕ ИЗМЕЂУ АРОМАТИЧНИХ С-Н ДОНОРА И КИСЕОНИЧНИХ ЛИГАНАДА

Весна Рибић [a] https://orcid.org/0000-0001-8185-7433,
Ивана С. Вељковић [b] https://orcid.org/0000-0003-0584-4053,
Душан Ж. Вељковић [c] https://orcid.org/0000-0002-1382-8785

[a] *Јожеф Стефан Институт, Љубљана, Словенија;* [b] *Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију – Институт од националног значаја за Републику Србију, Београд, Србија;* [c] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12 – 16, Београд, Србија*
e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

С-Н/О интеракције спадају у групу слабих водоничних веза које имају значајну улогу у кристалним структурама и биолошким системима [1]. Оне су посебно значајне за стабилизацију структуре протеина. Процењено је да око 25% укупних водоничмних веза у протеиниома чине С-Н/О интеракције.

У овом раду смо проучавали утицај координације атома кисеоника на јачину С-Н/О-М интеракција у којима учествују ароматични С-Н донори. Проучавање је засновано на статистичкој анализи С-Н/О-М интеракција у кристалним структурама издвојеним из Кембричке базе структурних података (CSD) и квантнохемијским прорачунима.

Резултати су показали да су С-Н/О-М интеракције веома заступљена група нековалентних интеракција у кристалним структурама прелазних метала. Метали који најчешће учествују у овим интеракцијама су Cu, Co, Ni, Zn, и Cd. Геометрије С-Н/О-М интеракција су сличне геометријама класичних С-Н/О интеракција. Са друге стране, анализа израчунатих енергија С-Н/О-М интеракција показује да су ови контакти значајно јачи у поређењу са класичним С-Н/О водоничним везама (ΔE_{int} = -1,85 kcal/mol за С-Н/О-Zn интеракције).

[1] M. S. Weiss, M. Brandl, J. Suhnel, D. Pal, R. Hilgenfeld, *Trends Biochem. Sci.* **26** (2001) 521–523.

Захвалница: Ово истраживање је финансијски подржало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (уговор бр. 451-03-33/2026-03/200026 и 451-03-33/2026-03/200168).

C-H/O-M INTERACTIONS BETWEEN AROMATIC C-H DONORS AND OXYGEN-CONTAINING LIGANDS

Vesna Ribić [a] https://orcid.org/0000-0001-8185-7433,
Ivana S. Veljković [b] https://orcid.org/0000-0003-0584-4053,
Dušan Ž. Veljković [c] https://orcid.org/0000-0002-1382-8785

[a] *Jožef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia;* [b] *University of Belgrade – Institute for Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, Belgrade, Serbia;* [c] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12 – 16, Belgrade, Serbia*
e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

C-H/O interactions represent a group of weak hydrogen bonds that have significant roles in crystal structures and biological systems [1]. These interactions are especially important in protein structure stabilization. It was estimated that approximately 25% of the total number of hydrogen bonds in proteins are C-H/O interactions.

In this work, we have studied the influence of the coordination of oxygen atom on the strength of C-H/O-M interactions involving this atom and aromatic C-H donors. Study was based on the statistical analysis of C-H/O-M interactions in crystal structures extracted from Cambridge Structural Database (CSD) and quantum chemical calculations.

The results showed that C-H/O-M interactions are very common type of non-covalent interactions in crystal structures of transition metals. The most common metals involved in these interactions are Cu, Co, Ni, Zn, and Cd. The geometries of C-H/O-M are similar to the geometries of classical C-H/O interactions. On the other hand, analysis of calculated interaction energies of C-H/O-M interactions showed that these contacts are significantly stronger compared to classical C-H/O hydrogen bonds (ΔE_{int} = -1.85 kcal/mol for C-H/O-Zn interactions).

[1] M. S. Weiss, M. Brandl, J. Suhnel, D. Pal, R. Hilgenfeld *Trends Biochem. Sci.* **26** (2001) 521–523.

Acknowledgement: This research has been financially supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract No. 451-03-33/2026-03/200026 and 451-03-33/2026-03/200168).

СИНТЕЗА, КРИСТАЛОГРАФСКА АНАЛИЗА И ФОТОКАТАЛИТИЧКА АКТИВНОСТ Ag(I) КООРДИНАЦИОНИХ ПОЛИМЕРА СА ЛИГАНДИМА НА БАЗИ ТИОМОРФОЛИНА И ПИПЕРАЗИНА

Предраг Ристић [a] https://orcid.org/0000-0002-7489-6132,
Вељко Ђокић [b] https://orcid.org/0000-0003-2541-0420,
Јасминка Поповић [c] https://orcid.org/0000-0003-0800-2249,
Ненад Филиповић [d] https://orcid.org/0000-0003-2982-5324,
Тамара Тодоровић [a] https://orcid.org/0000-0002-7740-3639

[a] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија;* [b] *Иновациони центар Технолошко-Металуршког факултета Универзитета у Београду, Карнегијева 4, Београд, Србија;* [c] *Институт Руђер Бошковић, Бијеничка цеста 54, Загреб, Хрватска;* [d] *Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Немањина 6, Београд, Србија*
e-mail: predrag@chem.bg.ac.rs

Полазећи од $AgSbF_6$ и лиганада тиоморфолин-4-карбонитрила (L1) и пиперазин-1,4-дикарбонитрила (L2), синтетисана су и структурно окарактерисана применом рендгенске структурне анализе два нова координациона полимера $\{[Ag(L1)_2]SbF_6\}_\infty$ (**1**) и $\{[Ag(L2)_2]SbF_6\}_\infty$ (**2**). Дводимензионални (2D) координациони полимер **1** кристалише у орторомбичној *Pnma* просторној групи, док тродимензионални координациони полимер (3D) **2** кристалише у моноклиничној $P2_1/c$ просторној групи.

Тестирана је фотокаталитичка активност **1** и **2** у реакцији деградације органске боје Mordant Blue 9 (MB9) као модел система органског полутанта. Експерименти са хватачима активних врста указују на то да се фотокаталитичка деградација MB9 дешава посредством супероксид-радикал анјона. Додатно, тест испитивања поновне употребе у сукцесивним фотокаталитичким циклусима указује на то да 3D полимер **2** поседује изузетну стабилност и могућност употребе у четири сукцесивна циклуса, задржавајући притом високу ефикасност деградације од 92% након последњег циклуса.

Како би се стекао дубљи увид у структурни интегритет ове класе материјала и боље разумели механизми фотокаталитичке деградације оваквих и сличних система, спроведена је детаљна анализа кристалних структура похрањених у Кембричкој кристалографској бази (CSD) [1].

[1] C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot and S. C. Ward, *Acta Cryst.*, **B72** (2016) 171–179.

Захвалница: Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Евиденциони бројеви: 451-03-33/2026-03/200168, 451-03-33/2026-03/200287 и 451-03-34/2026-03/200116).

SYNTHESIS, CRYSTALLOGRAPHIC ANALYSIS, AND PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF Ag(I) COORDINATION POLYMERS WITH THIOMORPHOLINE- AND PIPERAZINE-BASED LIGANDS

Predrag Ristić [a] https://orcid.org/0000-0002-7489-6132,
Veljko Đokić [b] https://orcid.org/0000-0003-2541-0420,
Jasminka Popović [c] https://orcid.org/0000-0003-0800-2249,
Nenad Filipović [d] https://orcid.org/0000-0003-2982-5324,
Tamara Todorović [a] https://orcid.org/0000-0002-7740-3639

[a] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;* [b] *Innovation Center of the Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia;* [c] *Institute Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb, Croatia;* [d] *University of Belgrade – Faculty of Agriculture, Nemanjina 6, Belgrade, Serbia*
e-mail: predrag@chem.bg.ac.rs

Starting from $AgSbF_6$ and the ligands thiomorpholine-4-carbonitrile (L1) and piperazine-1,4-dicarbonitrile (L2), two new coordination polymers, $\{[Ag(L1)_2]SbF_6\}_\infty$ (**1**) and $\{[Ag(L2)_2]SbF_6\}_\infty$ (**2**), were synthesized and structurally characterized by single-crystal X-ray diffraction analysis. The two-dimensional (2D) coordination polymer **1** crystallizes in the orthorhombic space group *Pnma*, whereas the three-dimensional (3D) coordination polymer **2** crystallizes in the monoclinic space group $P2_1/c$.

The photocatalytic activity of **1** and **2** was evaluated in the degradation reaction of the organic dye Mordant Blue 9 (MB9), used as a model organic pollutant. Scavenger experiments indicate that the photocatalytic degradation of MB9 proceeds predominantly *via* superoxide radical anions. Furthermore, recycling tests performed through successive photocatalytic cycles reveal that the 3D polymer **2** exhibits remarkable stability and reusability, maintaining high degradation efficiency of 92% after four consecutive cycles.

To gain deeper insight into the structural integrity of this class of materials and to better understand the mechanisms underlying photocatalytic degradation in such and related systems, a comprehensive analysis of crystal structures deposited in the Cambridge Structural Database (CSD) [1] was conducted.

[1] C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot and S. C. Ward, *Acta Cryst.*, **B72** (2016) 171–179.

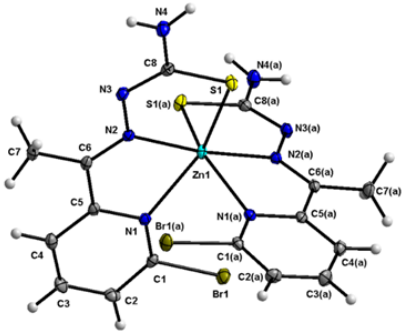
Acknowledgement: Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract numbers: 451-03-33/2026-03/200168, 451-03-33/2026-03/200287 & 451-03-34/2026-03/200116).

KOMPARATIVNA BIOLOŠKA AKTIVNOST Mn(II) I Zn(II) HIDRAZONSKIH KOMPLEKSA

Milica Savić [a] https://orcid.org/0000-0002-3568-5367,
Mima Jevtović [b] https://orcid.org/0000-0001-6039-5452,
Matija Zlatar [a] https://orcid.org/0000-0002-3809-0940,
Božidar Čobeljić [c] https://orcid.org/0000-0001-6335-0196

[a] *Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Njegoševa 12, Beograd, Srbija;*
[b] *Inovacioni centar Hemijskog fakulteta, Studentski trg 12-6; Beograd, Srbija;*
[c] *Univerzitet u Beogradu – Hemijski fakultet, Studentski trg 12-16, Beograd, Srbija*
e-mail: milica.savic@ihtm.bg.ac.rs

Strukturno srodni Mn(II) i Zn(II) hidrazonski kompleksi upoređeni su korišćenjem jedinstvenog strukturnog, računarskog i biološkog pristupa. Na osnovu rendgenske strukturne analize, Zn(II) kompleks pokazuje deformisano oktaedarsko koordinaciono okruženje sa NNS donorskim setom (slika 1), slično Mn(II) kompleksima. Koordinacija liganda u rastvoru potvrđena je spektroskopskim tehnikama (IR, NMR i UV-Vis). Na osnovu proračuna, primenom teorije funkcionala gustine (DFT), utvrđeno je da su sva jedinjenja termodinamički stabilna u DMSO-u. Citotoksična aktivnost kompleksa ispitana je na pet humanih ćelijskih linija raka (HeLa; A549; MDA-MB-231; K562; i LS 174T), kao i na normalnim humanim fibroblastima pluća (MRC-5). Mn(II) kompleksi pokazali su izražene citotoksične efekte, povezane sa poremećajem ćelijskog ciklusa, indukcijom apoptoze i modulacijom intracelularnih nivoa reaktivnih kiseoničnih vrsta (ROS) u normalnim MRC-5 ćelijama. Zn(II) kompleks pokazao je jedinstven biološki profil. Pored toga, antimikrobna aktivnost ispitana je na određenim sojevima bakterija i gljivica, pri čemu je utvrđeno da koordinacija metala značajno poboljšava aktivnost u poređenju sa slobodnim ligandom.



Slika 1. ORTEP prikaz kompleksa $[Zn(L)_2]$. Termalni elipsoidi prikazani su na nivou verovatnoće od 30%. Simetrijske transformacije: (a) –x+1, y, –z+1/2.

Zahvalnica: Autori su zahvalni Ministarstvu nauke, tehnološkog razvoja i inovacija Republike Srbije na finansijskoj podršci (brojevi projekata: 451-03-33/2026-03/200026, 451-03-33/2026-03/ 200288 i 451-03-33/2026-03/200168).

COMPARATIVE BIOLOGICAL ACTIVITY OF Mn(II) AND Zn(II) HYDRAZONE COMPLEXES

Milica Savić [a] https://orcid.org/0000-0002-3568-5367,
Mima Jevtović [b] https://orcid.org/0000-0001-6039-5452,
Matija Zlatar [a] https://orcid.org/0000-0002-3809-0940,
Božidar Čobeljić [c] https://orcid.org/0000-0001-6335-0196

[a] *Institute of chemistry, technology and metallurgy, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia;* [b] *Innovative Centre of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;* [c] *University of Belgrade – Faculty of chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia*
e-mail: milica.savic@ihtm.bg.ac.rs

Structurally related Mn(II) and Zn(II) hydrazone complexes are compared using a unified structural, computational, and biological framework. The Zn(II) complex adopts a distorted octahedral coordination environment with a NNS donor set (Fig. 1) similar to Mn(II) complexes, according to single-crystal X-ray diffraction. Ligand coordination in solution was verified by spectroscopic techniques (IR, NMR, and UV-Vis). Based on the calculations utilizing density functional theory (DFT), all compounds are thermodynamically stable in DMSO. Five human cancer cell lines (HeLa; A549; MDA-MB-231; K562; and LS 174T) and human normal lung fibroblasts (MRC-5) were used to test the cytotoxic activity of all complexes. The Mn(II) complexes exhibited pronounced cytotoxic effects, associated with cell cycle perturbation, apoptosis induction, and modulation of intracellular ROS levels in normal MRC-5 cells. A unique biological profile was shown by the Zn(II) complex. Additionally, antimicrobial activity was assessed against specific strains of bacteria and fungi, and it was discovered that metal coordination significantly improves activity in comparison to free ligands.

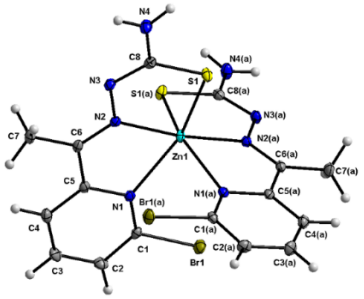


Fig. 1. ORTEP representation of the $[Zn(L)_2]$ complex. The thermal ellipsoids are drawn at the 30% probability level. Symmetry code: (a) –x+1, y, –z+1/2.

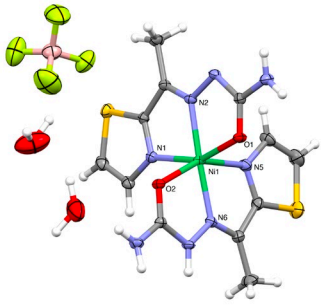
Acknowledgement: The authors are grateful to the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia for the financial support (Grant No.: 451-03-33/2026-03/200026, 451-03-33/2026-03/200288 and 451-03-33/2026-03/200168).

FORMIRANJE MONONUKLEARNOG KOMPLEKSA NIKLA(II) SA 2-ACETILTIAZOL SEMIKARBAZONOM

Snežana Selaković [a] https://orcid.org/ 0000-0003-2676-364X,
Milica Savić [b] https://orcid.org/0000-0002-3568-5367,
Maja Gruden [c] https://orcid.org/0000-0002-0746-5754,
Maja Šumar Ristović [c] https://orcid.org/0000-0002-2733-8955

[a] *Univerzitet u Beogradu – Farmaceutski fakultet, Beograd, Srbija;* [b] *Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Beograd, Srbija;* [c] *Univerzitet u Beogradu – Hemijski fakultet, Beograd, Srbija*
e-mail: sselakovic@pharmacy.bg.ac.rs

Mononuklearni kompleks nikla(II) sintetisan je reakcijom $Ni(BF_4)_2 \cdot 6H_2O$ sa kondenzacionim proizvodom semikarbazid-hidrohlorida i 2-acetiltiazola (H**L**). Kristalna struktura kompleksa određena je primenom rendgenske strukturne analize. Rendgenska strukturna analiza pokazala je da kompleks ima molekulsku formulu $[Ni(\mathbf{L})(H\mathbf{L})]BF_4 \cdot 2H_2O$ (slika 1). U dobijenom Ni(II) kompleksu, dva semikarbazonska liganda koordinovana su preko N,N,O donorskih atoma: azometinskog azota, hidrazinskog azota i karbonilnog kiseonika. Jedan ligand koordinovan je u neutralnom obliku (H**L**), dok je drugi koordinovan u deprotonovanom obliku ($\mathbf{L}^-$). Kompleks kristališe u trikliničnom kristalnom sistemu, u prostornoj grupi $P\bar{1}$.
Odabrani kristalografski podaci i parametri utačnjavanja: $C_{12}H_{19}BF_4N_8NiO_4S_2$, a = 8,4827(5) Å, b = 11,5210(7) Å, c = 12,0122(6) Å, α = 104,697(5)º, β = 94,783(4)º, γ = 107,377(5)º, V = 1067,48(11) Å^3, Z = 2, R = 3,58 za 318 parametara i 4879 nezavisnih refleksija.



Slika 1. Molekulska struktura kompleksa $[Ni(\mathbf{L})(H\mathbf{L})]BF_4 \cdot 2H_2O$.

Zahvalnica: Ovo istraživanje finansiralo je Ministarstvo nauke, tehnološkog razvoja i inovacija Republike Srbije (brojevi ugovora.: 451-03-33/2026-03/200161, 451-03-34/2026-03/200161, 451-03-33/2026-03/200026, 451-03-34/2026-03/200026, 451-03-33/2026-03/200168 i 451-03-34/2026-03/200168).

FORMATION OF A MONONUCLEAR NICKEL(II) COMPLEX WITH 2-ACETYLTHIAZOLE SEMICARBAZONE

Snežana Selaković [a] https://orcid.org/ 0000-0003-2676-364X,
Milica Savić [b] https://orcid.org/0000-0002-3568-5367,
Maja Gruden [c] https://orcid.org/0000-0002-0746-5754,
Maja Šumar Ristović [c] https://orcid.org/0000-0002-2733-8955

[a] *University of Belgrade – Faculty of Pharmacy, Belgrade, Serbia;* [b] *Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia;* [c] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia*
e-mail: sselakovic@pharmacy.bg.ac.rs

The mononuclear nickel(II) complex was obtained by the reaction of $Ni(BF_4)_2 \cdot 6H_2O$ with the condensation product of semicarbazide hydrochloride and 2-acetylthiazole (H**L**). Crystal structure of nickel(II) complex was determined by single crystal X-ray diffraction analysis. Single-crystal X-ray analysis showed that the complex has the molecular formula $[Ni(\mathbf{L})(H\mathbf{L})]BF_4 \cdot 2H_2O$ (Figure 1). In the obtained Ni(II) complex, two semicarbazone ligands are coordinated through N,N,O donor atoms: azomethine nitrogen, hydrazine nitrogen, and carbonyl oxygen. One ligand is coordinated in its neutral form (H**L**), while the other is coordinated in its deprotonated form ($\mathbf{L}^-$). The compound crystallizes in triclinic space group $P\bar{1}$.
Selected crystallographic data and refinement details: $C_{12}H_{19}BF_4N_8NiO_4S_2$, a = 8.4827(5) Å, b = 11.5210(7) Å, c = 12.0122(6) Å, α = 104.697(5)º, β = 94.783(4)º, γ = 107.377(5)º, V = 1067.48(11) Å^3, Z = 2, R = 3.58 for 318 parameters and 4879 independent reflections.

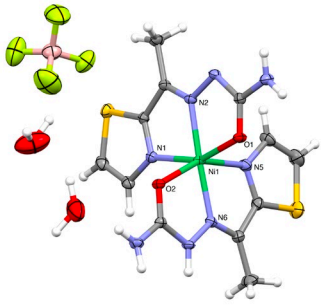


Figure 1. Molecular structure of the complex $[Ni(\mathbf{L})(H\mathbf{L})]BF_4 \cdot 2H_2O$.

Acknowledgement: This research was funded by the Ministry of Science, Technological Development, and Innovation of the Republic of Serbia (grant numbers: 451-03-33/2026-03/200161, 451-03-34/2026-03/200161, 451-03-33/2026-03/200026, 451-03-34/2026-03/200026, 451-03-33/2026-03/200168 and 451-03-34/2026-03/200168).

СИНТЕЗА И СТРУКТУРНА КАРАКТЕРИЗАЦИЈА АЗИДО-ПРЕМОШЋЕНОГ ДИНУКЛЕАРНОГ КОБАЛТ(III) КОМПЛЕКСА СА СЕМИКАРБАЗОНСКИМ ЛИГАНДОМ

Невена Стевановић [a] https://orcid.org/0000-0002-6906-207X,
Мима Јевтовић [b] https://orcid.org/0000-0001-6039-5452,
Теодора Витомиров [a] https://orcid.org/0000-0002-0549-6450,
Маја Груден [a] https://orcid.org/0000-0002-0746-5754

[a] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија;* [b] *Иновациони центар Хемијског факултет д.о.о, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија*
e-mail: nstevanovic@chem.bg.ac.rs

Динуклеарни комплекс Co(III) јона са семикарбазонским лигандом, изведеним из 2-ацетилтиазола и семикарбазид хидрохлорида, синтетисан је и структурно окарактерисан. Лиганд (*E*)-2-(1-(тиазол-2-ил)етилидин)хидразин-1-карбоксиамид (H**L**) добијен је кондензационом реакцијом у воденој средини под благо киселим условима, а његова структура потврђена је елементалном анализом, IC, ^{1}H и ^{13}C NMR спектроскопијом. Реакцијом лиганда, H**L**, са $Co(BF_4)_2 \cdot 6H_2O$ и NaN_3 у смеши метанол/вода синтетисан је динуклеарни комплекс опште формуле $[Co_2\mathbf{L}_2(\mu\text{-}1,1\text{-}N_3)_2(N_3)_2]$. Добијени комплекс изолован је у облику браон монокристала погодних за рендгенску структурну анализу. IC спектроскопска анализа указала је на координацију лиганда преко азометинског атома азота, хидразинског атома азота и карбонилног атома кисеоника (тридентатни NNO-донорски систем). Померање траке ν(C=N), слабљење ν(C=O) вибрације, као и појава карактеристичних трака азидо лиганда у области око 2065 cm^{-1} потврђују формирање координационог једињења. NMR спектри комплекса показују промене хемијских померања протона и угљеникових атома укључених у координацију, што је у сагласности са спектроскопским подацима и предложеним начином везивања лиганда. Рендгенска структурна анализа показала је да комплекс кристалише у триклиничном кристалном систему, просторна група $P\bar{1}$, и садржи центросиметрично динуклеарно језгро $\{Co_2(\mu\text{-}1,1\text{-}N_3)_2\}$. Око сваког Co(III) јона формирана је деформисана октаедарска геометрија коју чине тридентатни NNO лиганд, један терминални и два мостна азидо лиганда. Азидо лиганди координишу у end-on (μ-1,1) моду, градећи стабилно динуклеарно језгро са Co···Co растојањем од приближно 3,22 Å. Добијени резултати потврђују значај азидо лиганада у стабилизацији полинуклеарних структура и доприносе бољем разумевању координационе хемије Co(III) комплекса са семикарбазонским лигандима.

Захвалница: Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије, Евиденциони бројеви: 451-03-33/2026-03/200168, 451-03-33/2026-03/ 200288

STRUCTURAL ELUCIDATION OF AN AZIDE-BRIDGED DINUCLEAR COBALT(III) COMPLEX WITH A SEMICARBAZONE LIGAND

Nevena Stevanović [a] https://orcid.org/0000-0002-6906-270X,
Mima Jevtović [b] https://orcid.org/0000-0001-6039-5452,
Teodora Vitomirov [a] https://orcid.org/0000-0002-0549-6450,
Maja Gruden [a] https://orcid.org/0000-0002-0746-5754

[a] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia;* [b] *Innovative Centre of the Faculty of Chemistry ltd, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia*
e-mail: nstevanovic@chem.bg.ac.rs

A new dinuclear Co(III) complex containing a semicarbazone ligand derived from 2-acetylthiazole and semicarbazide hydrochloride was synthesized and structurally characterized. The ligand, (*E*)-2-(1-(thiazol-2-yl)ethylidene)hydrazine-1-carboxamide (H**L**), was obtained by a condensation reaction under mildly acidic aqueous conditions, and its structure was confirmed by elemental analysis, IR, ^{1}H and ^{13}C NMR spectroscopy. Reaction of H**L** with $Co(BF_4)_2 \cdot 6H_2O$ and NaN_3 in a methanol/water mixture afforded a dinuclear complex of the general formula $[Co_2\mathbf{L}_2(\mu\text{-}1,1\text{-}N_3)_2(N_3)_2]$. Brown single crystals suitable for X-ray diffraction analysis were obtained by slow solvent evaporation. IC analysis indicated coordination of the ligand through the azomethine nitrogen atom, hydrazinic nitrogen atom, and carbonyl oxygen atom, confirming the tridentate NNO donor character of the ligand. The shift of the ν(C=N) band, attenuation of the ν(C=O) vibration, and the appearance of characteristic azide stretching bands around 2065 cm^{-1} confirmed the formation of the coordination compound. NMR spectra of the complex revealed changes in the chemical shifts of the protons and carbon atoms involved in coordination, supporting the proposed coordination mode. Single-crystal X-ray diffraction analysis revealed that the complex crystallizes in the triclinic crystal system, space group $P\bar{1}$, and contains a centrosymmetric $\{Co_2(\mu\text{-}1,1\text{-}N_3)_2\}$ dinuclear core. Each Co(III) center adopts a distorted octahedral coordination geometry formed by one tridentate NNO ligand, one terminal azide ligand, and two bridging azide ligands. The azide groups coordinate in an end-on (μ-1,1) bridging mode, generating a stable dinuclear structure with a Co···Co separation of approximately 3.22 Å. The obtained results highlight the structural role of azide ligands in stabilizing polynuclear cobalt systems and contribute to a better understanding of the coordination chemistry of Co(III) complexes with semicarbazone ligands.

Acknowledgement: Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia, Contract numbers: 451-03-33/2026-03/200168, 451-03-33/2026-03/200288

XRD STUDIJA POLIURETAN/TiO_2 NANOKOMPOZITA

Ivan Stefanović [a] https://orcid.org/0000-0002-2679-0341,
Jasna Džunuzović [a,b] https://orcid.org/0000-0003-0681-9781,
Enis Džunuzović [c] https://orcid.org/0000-0002-7791-4076,
Carla Marega [d] https://orcid.org/0000-0002-0485-4180

[a] *Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Institut od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju, Univerzitet u Beogradu, Njegoševa 12, 11000 Beograd, Srbija;* [b] *Centar izuzetnih vrednosti za hemiju i inženjering životne sredine, Institut od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju, Univerzitet u Beogradu, Njegoševa 12, 11000 Beograd, Srbija;* [c] *Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11020 Beograd, Srbija;* [d] *Departman hemijskih nauka, Univerzitet u Padovi, via Marzolo 1, 35131 Padova, Italija*
e-mail: ivan.stefanovic@ihtm.bg.ac.rs

U ovom radu su sintetisani umreženi poliuretani (PUN) i njihovi nanokompoziti (PUN-NC), na bazi polikaprolaktona (PCL), izoforon diizocijanata (IPDI), Boltorn® alifatskog hiperrazgranatog poliestra druge pseudo generacije (BH-20) i različitih mas.% (0,5, 1,0 i 2,0) nemodifikovanih i površinski modifikovanih TiO_2 nanočestica. Modifikacija površine TiO_2 nanočestica izvršena je lauril galatom. Za ispitivanje strukture ovih PUN i PUN-NC uzoraka korišćena je rendgenska difrakcija (XRD).
Na XRD dijagramu PCL prisutne su refleksije koje se uočavaju na uglovima 2θ = 21,5°, 22,1° i 23,8°, koje odgovaraju ravnima (110), (111) i (200) ortorombične kristalne rešetke. Ove refleksije su karakteristične za semikristalinični PCL. S druge strane, na XRD dijagramima PUN i PUN-NC uzoraka, vidljive su široke refleksije koje predstavljaju amorfne haloe u opsegu 2θ od 12° do 25°, što ukazuje na amorfni karakter pripremljenih uzoraka, zbog velikog stepena umreženosti pripremljenih uzoraka [1,2].

[1] J. V. Džunuzović, I. S. Stefanović, E. S. Džunuzović, T. S. Kovač, D. P. Malenov, A. Basagni, C. Marega, *Polymers*, **16** (2024) 1812.
[2] I. S. Stefanović, J. V. Džunuzović, E. S. Džunuzović, D. V. Randjelović, V. B. Pavlović, A. Basagni, C. Marega, *Coatings*, **15** (2025) 231.

Zahvalnica: Ovo istraživanje je podržano od strane Ministarstva nauke, tehnološkog razvoja i inovacija Republike Srbije (broj ugovora: 451-03-33/2026-03/200026 i 451-03-34/2026-03/200135), i Fonda za nauku Republike Srbije, program PRIZMA, grant broj 5354, Višefunkcionalni neorgansko-organski hibridi koji reaguju na vidljivu svetlost za efikasnu proizvodnju vodonika i dezinfekciju - HYDIS.

XRD STUDY OF THE POLYURETHANE/TiO_2 NANOCOMPOSITES

Ivan Stefanović [a] https://orcid.org/0000-0002-2679-0341,
Jasna Džunuzović [a,b] https://orcid.org/0000-0003-0681-9781,
Enis Džunuzović [c] https://orcid.org/0000-0002-7791-4076,
Carla Marega [d] https://orcid.org/0000-0002-0485-4180

[a] *Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia;* [b] *University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Center of Excellence in Environmental Chemistry and Engineering, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia;* [c] *Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11020 Belgrade, Serbia;* [d] *Department of Chemical Sciences, University of Padova, via Marzolo 1, 35131 Padova, Italy*
e-mail: ivan.stefanovic@ihtm.bg.ac.rs

Polyurethane networks (PUNs) and their nanocomposites (PUN-NCs), based on polycaprolactone (PCL), isophorone diisocyanate (IPDI), Boltorn® aliphatic hyperbranched polyester of the second pseudo generation (BH-20), and various wt.% (0.5, 1.0 and 2.0) of unmodified and surface modified TiO_2 nanoparticles, were synthesized. The surface modification of TiO_2 nanoparticles was performed with lauryl gallate. X-ray diffraction (XRD) analysis was used to investigate the structure of the prepared PUN and PUN-NCs.
XRD pattern of PCL shows reflections at 2θ = 21.5°, 22.1° and 23.8°, corresponding to the (110), (111) and (200) planes of the orthorhombic crystal lattice, respectively. These reflections are characteristics of semicrystalline PCL. On the other hand, in the XRD patterns of the PUN and PUN-NCs, broad reflections in the range 2θ from 12° to 25°, ascribed to amorphous halos, are visible, indicating the amorphous character of the prepared samples, due to the presence of a highly crosslinked structure [1,2].

[1] J. V. Džunuzović, I. S. Stefanović, E. S. Džunuzović, T. S. Kovač, D. P. Malenov, A. Basagni, C. Marega, *Polymers*, **16** (2024) 1812.
[2] I. S. Stefanović, J. V. Džunuzović, E. S. Džunuzović, D. V. Randjelović, V. B. Pavlović, A. Basagni, C. Marega, *Coatings*, **15** (2025) 231.

Acknowledgement: This research was supported by Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia (contract no.: 451-03-33/2026-03/200026 and 451-03-34/2026-03/200135), and the Science Fund of the Republic of Serbia, program PRISMA, grant no. 5354, Multifunctional visible-light-responsive inorganic-organic hybrids for efficient hydrogen production and disinfection - HYDIS.

ПОКАЗАТЕЉИ СТРУКТУРНЕ ДЕСИМЕТРИЗАЦИЈЕ КОД $Grs_{58–64}Adr_{36–41}Sps_2$ ГРАНДИТА ОДРЕЂЕНИ МЕТОДОМ РЕНДГЕНСКЕ ДИФРАКЦИЈЕ НА МОНОКРИСТАЛУ

Павле Танчић [a] http://orcid.org/0000-0002-4024-710X,
Марко Родић [b] https://orcid.org/0000-0002-4471-8001,
Александар Кременовић [c] https://orcid.org/0000-0001-8845-2332,
Љиљана Карановић [c] https://orcid.org/0000-0001-9534-1315

[a] *Универзитет у Београду, Институт за хемију, технологију и металургију, Његошева 12, 11000 Београд, Србија;* [b] *Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Трг Доситеја Обрадовића 3, 21000 Нови Сад, Србија;*
[c] *Универзитет у Београду, Рударско-геолошки факултет, Ђушина 7, 11000 Београд, Србија*
e-mail: pavletan@gmail.com

По нашим сазнањима, до сада су само четири зонарна и оптички анизотропна гросуларско-андрадитска минерала (грандита) из Србије окарактерисана различитим методама, и то три из скарнова [1-6] и један из родингита [7]. У овом раду, методом рендгенске дифракције на монокристалу проучавано је пет зона грандита $Grs_{58–64}Adr_{36–41}Sps_2$, за кога је претходно утврђено да кристалише у ромбоедарској просторној групи $R\ \bar{3}\,c$ [1-3]. Добијени резултати јасно показују да је код овог грандита заиста дошло до структурне десиметризације. Наиме, одступања од тесералног система и просторне групе $I\,a\ \bar{3}\,d$ се огледају у тзв. систематском кршењу правила за одсуство рефлексија [systematic absence violations ($I > 3\sigma(I)$)]. Такође, дужине оса тесералне јединичне ћелије незнатно се међусобно разликују, а углови благо одступају од 90°. Овај феномен је кључан у разумевању физичких особина материјала и фазних прелаза.

[1] P. Tančić, P. Vulić, R. Kaindl, B. Sartory, R. Dimitrijević, *Acta Geologica Sinica-English Edition*, **86(2)** (2012) 393–406.
[2] P. Tančić, A. Kremenović, P. Vulić, *Powder Diffraction*, **35(1)** (2020) 7–16.
[3] P. Tančić, A. Kremenović, *Geological Quarterly,* **66(7)** (2022) 1639.
[4] D. Srećković-Batočanin, N. Vasković, S. Milutinović, V. Ilić, Z. Nikić, *Proceedings of the XVI Serbian Geological Congress,* (2014) 265–268.
[5] B. Kostić, D. Srećković-Batočanin, P. Filipov, P. Tančić, K. Sokol, *Geologica Carpathica,* **73** (2021) 17–25.
[6] B. Kostić, P. Tančić, N. Batoćanin, *Geological Quarterly*, **68** (2024) 24.
[7] P. Tančić, S. Dušanić, S. Erić, *Powders*, **2(2)** (2023) 387–402.

Захвалница: Ово истраживање је финансијски подржало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (уговори бр. 451-03-33/2026-03/200026 и 451-03-34/2026-03/200126).

INDICATORS OF THE STRUCTURAL DISSYMETRIZATION OF THE $Grs_{58–64}Adr_{36–41}Sps_2$ GRANDITE DETERMINED WITH THE SINGLE CRYSTAL X-RAY DIFFRACTION METHOD

Pavle Tančić [a] http://orcid.org/0000-0002-4024-710X,
Marko Rodić [b] https://orcid.org/0000-0002-4471-8001,
Aleksandar Kremenović [c] https://orcid.org/0000-0001-8845-2332,
Ljiljana Karanović [c] https://orcid.org/0000-0001-9534-1315

[a] *University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia;* [b] *University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Serbia;* [c] *University of Belgrade, Faculty of Mining and Geology, Đušina 7, 11000 Belgrade, Serbia*
e-mail: pavletan@gmail.com

To the best of our knowledge, only four zonal and optically anisotropic grossular-andradite minerals (grandites) from Serbia have been characterized so far by different methods, *i.e.* three from skarns [1-6] and one from rodingite [7]. In this work, five zones of $Grs_{58–64}Adr_{36–41}Sps_2$ grandite were studied by single crystal X-ray diffraction, which was previously determined to crystallize in the rhombohedral space group $R\,\bar{3}\,c$ [1-3]. The results obtained clearly show that structural disymmetrization has indeed occurred in this grandite. Namely, deviations from the cubic system and the space group $I\,a\,\bar{3}\,d$ are reflected in the so-called "systematic absence violations $I > 3\sigma(I)$" factor. Also, the lengths of cubic unit-cell axes slightly differ from each other, whereas the observed angles deviate a little from 90°. This phenomenon is crucial in understanding the physical properties of materials and phase transitions.

[1] P. Tančić, P. Vulić, R. Kaindl, B. Sartory, R. Dimitrijević, *Acta Geologica Sinica-English Edition*, **86(2)** (2012) 393–406.
[2] P. Tančić, A. Kremenović, P. Vulić, *Powder Diffraction*, **35(1)** (2020) 7–16.
[3] P. Tančić, A. Kremenović, *Geological Quarterly,* **66(7)** (2022) 1639.
[4] D. Srećković-Batočanin, N. Vasković, S. Milutinović, V. Ilić, Z. Nikić, *Proceedings of the XVI Serbian Geological Congress,* (2014) 265–268.
[5] B. Kostić, D. Srećković-Batočanin, P. Filipov, P. Tančić, K. Sokol, *Geologica Carpathica,* **73** (2021) 17–25.
[6] B. Kostić, P. Tančić, N. Batoćanin, *Geological Quarterly*, **68** (2024) 24.
[7] P. Tančić, S. Dušanić, S. Erić, *Powders*, **2(2)** (2023) 387–402.

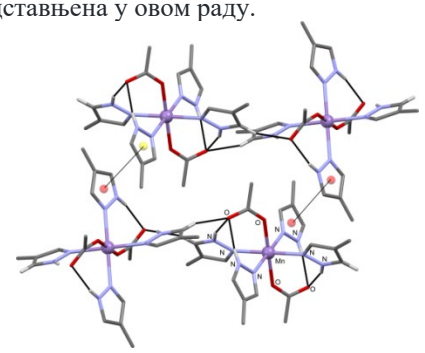
Acknowledgement: This research has been financially supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contracts No. 451-03-33/2026-03/200026 and 451-03-34/2026-03/200126).

СУПРАМОЛЕКУЛСКА СВОЈСТВА КРИСТАЛНИХ СТРУКТУРА $[Mn(OAc)_2L_4]$ (L = 4-МЕТИЛПИРАЗОЛ) И СТРУКТУРНО СЛИЧНИХ ЈЕДИЊЕЊА

Жељко Јаћимовић [a] https://orcid.org/0000-0001-6803-3835,
Зоран Д. Томић [b] https://orcid.org/0000-0003-4436-1724,
Франц Пердих[c] https:// orcid.org/0000-0002-8416-7291,
Милица Вујић [a] https://orcid.org/0009-0004-2065-7699

[a] *Технолошки факултет, Џорџа Вашингтона бб, Универзитет Црне Горе, Подгорица, Црна Гора;* [b] *Институт за нуклеарне науке „Винча", Национални институт Републике Србије, Универзитет у Београду, Србија;* [c] *Факултет за хемију и хемијску технологију, Универзитет у Љубљани, Словенија*
e-mail: zorant@vin.bg.ac.rs

Јон Mn(II) се налази у центру симетрије и координован је са четири лиганда 4-метилпиразола и два ацетатна лиганда у деформисаном октаедарском окружењу. Структура молекула је стабилизована интрамолекулским N–H···O интеракцијама које гради некоординовани атом кисеоника са два суседна пиразолна прстена. Међумолекулске C–H···O интеракције повезују молекуле у низ. Суседни низови су повезани "стекинг" интеракцијама (слика). $[Mn(OAc)_2L_4]$ је изоструктуран са $[Ni(OAc)_2L_4]$ [1]. Да бисмо стекли додатни увид у начине агрегације овог и сличних молекула упоредили смо добијену структуру са структурама сличних једињења. У аналогној структури $[Cu(NO_3)_2L_4]$, формирају се другачије међумолекулске интеракције. У $[Fe(Cl)_2L_4]Cl$, некоординовани хлор учествује у међумолекулским контактима што доводи до различитог распореда суседних молекула. Код $[Ni(Cl)_2L_4]\cdot 2CH_3CN$, где се очекивао утицај растварача, опажене су исте међумолекулске интеракције као код $[Mn(OAc)_2L_4]$. У $[Cu(CF_3COO)_2L_4]$ суседни молекули се повезују на исти начин и формирају молекулски низ али нема интеракција суседних низова. Детаљнија анализа супрамолекулских својстава ових једињења ће бити представњена у овом раду.



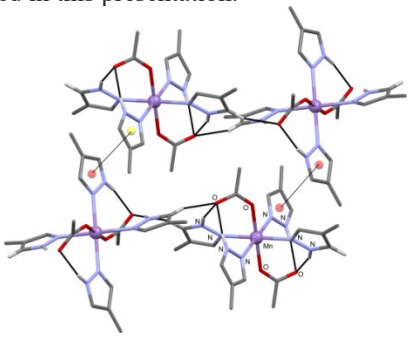
[1] D. Kočović, B. B. Holló, I. Borišev, V. Leovac, Lj. V. Ješić, G. Giester, S. Shova, Z. D. Tomić, Ž. Jaćimović, *Inorganica Chimica Acta,* **574** (2025) 122363.

SUPRAMOLECULAR FEATURES OF THE CRYSTAL STRUCTURES OF $[Mn(OAc)_2L_4]$ (L = 4-METHYLPYRAZOLE) AND RELATED COMPOUNDS

Željko Jaćimović [a] https://orcid.org/0000-0001-6803-3835,
Zoran D. Tomić [b] https://orcid.org/0000-0003-4436-1724,
Franc Perdih [c] https://orcid.org/0000-0002-8416-7291,
Milica Vujić [a] https://orcid.org/0009-0004-2065-7699

[a] *Faculty of Technology, Džordža Vašingtona bb, University of Montenegro, Podgorica, Montenegro;* [b] *"VINČA" Institute of Nuclear Sciences, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Serbia;* [c] *Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Slovenia*
e-mail: zorant@vin.bg.ac.rs

The Mn(II) ion, located on an inversion center, adopts a distorted octahedral geometry and is coordinated by four 4-methylpyrazole ligands and two acetato ligands. The noncoordinated oxygen atom forms two intramolecular N–H···O hydrogen bonds. Molecules associate into chains through C–H···O interactions, and neighboring chains are connected via stacking interactions (Figure). $[Mn(OAc)_2L_4]$ is isostructural with $[Ni(OAc)_2L_4]$ [1]. To gain further insight into the aggregation of this and related molecules, we compare the title structure with structurally analogous compounds. When the metal is replaced with Cu in $[Cu(NO_3)_2L_4]$, the pattern of intermolecular interactions differs. In $[Fe(Cl)_2L_4]Cl$, the solvent chloride participates in intermolecular contacts, resulting in different spatial arrangements of the complex molecules. In $[Ni(Cl)_2L_4]\cdot 2CH_3CN$, the presence of solvent does not affect the intermolecular interaction pattern observed in the title compound. In $[Cu(CF_3COO)_2L_4]$, the same contacts as in the title structure lead to the formation of molecular chains; however, interchain stacking interactions are absent. Further details regarding the supramolecular features of these compounds will be discussed in this presentation.



[1] D. Kočović, B. B. Holló, I. Borišev, V. Leovac, Lj. V. Ješić, G. Giester, S. Shova, Z. D. Tomić, Ž. Jaćimović, *Inorganica Chimica Acta,* **574** (2025) 122363.

АНАЛИЗА ВЕЗИВАЊА ПФАС ЗА ХУМАНИ α2-МАКРОГЛОБУЛИН: УЛОГА ФУНКЦИОНАЛНО ЗНАЧАЈНОГ ЦИСТЕИНСКОГ ОСТАТКА

Александра Ђурђевић Ђелмаш [a] https://orcid.org/0000-0002-6951-4507,
Данило Трајковић [a] https://orcid.org/0009-0006-0729-1121,
Милица Радибратовић [b] https://orcid.org/0000-0003-4708-6633,
Драган Нинковић [b] https://orcid.org/0000-0002-6448-6527,
Карла Милчић [b] https://orcid.org/0000-0002-3672-4575,
Милош Милчић [a] https://orcid.org/0000-0002-0082-5278

[a] *Универзитет у Београду– Хемијски факултет; Студентски трг 12-16, Београд, Србија;* [b] *Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију, Његошева 12, Београд, Србија*
e-mail: danilotrajkovic04@gmail.com

Пер- и полифлуороалкил супстанце (ПФАС) представљају једну од најзначајнијих група савремених загађујућих супстанци, које се одликују изузетном хемијском стабилношћу и перзистентношћу у животној средини. Управо због јаке C–F везе, ова једињења су отпорна на биолошку и хемијску разградњу, што доводи до њихове акумулације у екосистемима и детекције у људској крви, са доказаним утицајем на нарушавање физиолошке хомеостазе [1]. У овом раду испитан је утицај перфлуороалкилкарбоксилних киселина различите дужине ланца (трифлуорсирћетне (ТФА), перфлуорбутанске (ПФБА) и перфлуороктанске (ПФОА)) на хумани протеин α2-макроглобулин (α2M). α2-макроглобулин је главни антипротеазни протеин хумане крви, комплексне структуре и молекулске масе од 720 килодалтона [2]. Применом метода рачунарске хемије анализиране су остварене интеракције ових једињења са хуманим α2M, коришћењем кристалне и AlphaFold структуре протеина. Такође, применом експерименталних метода, испитан је потенцијални утицај ПФОА на антипротеазну активност протеина. Теоријски добијени резултати указују на везивање ПФОА у непосредној близини цистеинског остатка (Cys972) у кристалној структури протеина, који има кључну улогу у формирању тиоестарске везе неопходне за инхибицију протеаза. Ови резултати су у складу са експериментално добијеним резултатима и указују на потенцијалну могућност да ПФАС, кроз интеракције са функционално значајним местима у структури протеина, утичу на његову антипротеазну функцију.

[1] E. Panieri, K. Baralic, D. Djukic-Cosic, A. Buha Djordjevic, L. Saso, *Toxics*, **10** (2022) 44.
[2] A. A. Rehman, H. Ahsan, F. H. Khan, J. Cell. *Physiol.*, **228** (2013) 1665–1675.

Захвалница: Ово истраживање је финансијски подржано од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Уговор бр. 451-03-33/2026-03/200026 и Уговор бр. 451-03-33/2026-03/200168).

ANALYSIS OF PFAS BINDING TO HUMAN α2-MACROGLOBULIN: THE ROLE OF A FUNCTIONALLY RELEVANT CYSTEINE RESIDUE

Aleksandra Đurđević Đelmaš [a] https://orcid.org/0000-0002-6951-4507,
Danilo Trajković [a] https://orcid.org/0009-0006-0729-1121,
Milica Radibratović [b] https://orcid.org/0000-0003-4708-6633,
Dragan Ninković [b] https://orcid.org/0000-0002-6448-6527,
Karla Milčić [b] https://orcid.org/0000-0002-3672-4575,
Miloš Milčić [a] https://orcid.org/0000-0002-0082-5278

[a] *Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia;* [b] *University of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Serbia*
e-mail: danilotrajkovic04@gmail.com

Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) represent one of the most significant groups of emerging environmental contaminants, characterized by exceptional chemical stability and persistence in the environment. Due to the strength of the C–F bond, these compounds are highly resistant to biological and chemical degradation, leading to their accumulation in ecosystems and detection in human blood, with documented effects on the disruption of physiological homeostasis [1]. In this study, the effects of perfluoroalkyl carboxylic acids of varying chain lengths (trifluoroacetic (TFA), perfluorobutanoic (PFBA), and perfluorooctanoic (PFOA) acids) on the human protein α2-macroglobulin (α2M) were investigated. α2-Macroglobulin is the main antiprotease protein in human blood, characterized by a complex structure and a molecular weight of approximately 720 kDa [2]. Computational chemistry methods were employed to analyze the interactions of these compounds with human α2M, using both the crystal and AlphaFold protein structures. In addition, experimental methods were applied to assess the potential impact of PFOA on the antiprotease activity of the protein. The theoretical results indicate binding of PFOA in proximity to the cysteine residue (Cys972) within the crystal structure of the protein, which plays a crucial role in the formation of the thioester bond required for protease inhibition. These results are consistent with the experimental findings and suggest that PFAS, through interactions with functionally important sites within the protein structure, may influence its antiprotease function.

[1] E. Panieri, K. Baralic, D. Djukic-Cosic, A. Buha Djordjevic, L. Saso, *Toxics*, **10** (2022) 44.
[2] A. A. Rehman, H. Ahsan, F. H. Khan, J. Cell. *Physiol.*, **228** (2013) 1665–1675.

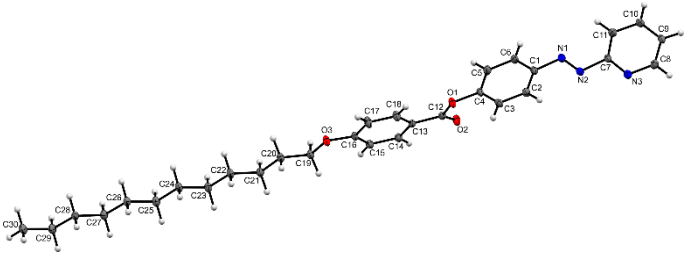
Acknowledgement: This research has been financially supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia (Contract No. 451-03-33/2026-03/200026 and Contract No. 451-03-33/2026-03/200168).

СУПРАМОЛЕКУЛСКА ОРГАНИЗАЦИЈА ТЕЧНОКРИСТАЛНОГ ДЕРИВАТА АЗОПИРИДИНА

Кристина Гак Симић [a] https://orcid.org/0000-0003-3928-9967,
Александра Машуловић [a] https://orcid.org/0000-0002-5279-7694,
Лидија Радовановић [a] https://orcid.org/0000-0002-7505-6290,
Немања Тришовић [b] https://orcid.org/ 0000-0002-9231-4810,
Olivier Jeannin [c] https://orcid.org/0000-0002-1411-5656,
Franck Camerel [c] https://orcid.org/ 0000-0003-3380-709X,
Ивана Ђорђевић [d] https://orcid.org/0000-0001-5981-9385

[a] *Иновациони центар Технолошко-метлуршког факултета у Београду, Карнегијева 4, 11120 Београд, Србија;* [b] *Универзитет у Београду, Технолошко-металуршки факултет, Карнегијева 4, 11120 Београд, Србија;* [c] *Универзитет у Рену, Avenue du general Leclerc 263, 35070 Рен, Француска;* [d] *Универзитет у Београду, Институт за хемију технологију и металургију, Институт од националног значаја за Републику Србију, Његошева 12, 11000, Београд, Србија*
e-mail: ntrisovic@tmf.bg.ac.rs

Синтетисан је течнокристални дериват азопиридина (слика 1), а његова кристална структура одређена је методом рендгенске структурне анализе на температури 150 К. У циљу разумевања супрамолекулске организације, кристално паковање анализирано је преко репрезентативних димерних мотива, од којих сваки описује специфичан начин молекулског препознавања. Молекули образују слојевиту структуру коју карактерише сегрегација поларних ароматичних језгара и хидрофобних додецил-ланаца. Унутар слојева ароматични фрагменти заузимају распоред „глава–реп“, док су додецил-ланци међусобно испреплетани. Што се тиче течнокристалних својстава проучаваног једињења, атом азота у *orto*-положају у односу на азо-групу доприноси дисторзији азопиридинског фрагмента, што омогућава формирање нематичке и смектичке А фазе.



Слика 1. ORTEP приказ проучаваног једињења.

Захвалница: Рад је подржан од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Бр. 451-03-33/2026-03/200026, 451-03-34/2026-03/200135 и 451-03-33/2026-03/200287).

SUPRAMOLECULAR ORGANIZATION OF A LIQUID-CRYSTALLINE AZOPYRIDINE DERIVATIVE

Kristina Gak Simić [a] https://orcid.org/0000-0003-3928-9967,
Aleksandra Mašulović [a] https://orcid.org/0000-0002-5279-7694,
Lidija Radovanović [a] https://orcid.org/0000-0002-7505-6290,
Nemanja Trišović [b] https://orcid.org/ 0000-0002-9231-4810,
Olivier Jeannin [c] https://orcid.org/0000-0002-1411-5656,
Franck Camerel [c] https://orcid.org/ 0000-0003-3380-709X,
Ivana Đorđević [d] https://orcid.org/0000-0001-5981-9385

[a] *Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, 11120 Belgrade, Serbia;* [b] *University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, 11120 Belgrade, Serbia;* [c] *University of Rennes, CNRS, ISCR, Avenue du general Leclerc 263, 35070 Rennes, France;* [d] *University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia*
e-mail: ntrisovic@tmf.bg.ac.rs

A liquid-crystalline azopyridine derivative (Figure 1) was synthesized, and its crystal structure was determined by single-crystal X-ray diffraction at 150 K. To gain insight into the supramolecular organization, the crystal packing was analyzed through representative dimeric motifs, each corresponding to a distinct mode of molecular recognition. The molecules assemble into a layered structure characterized by segregation of the polar aromatic cores and hydrophobic dodecyl chains. Within the layers, the aromatic moieties adopt a head-to-tail arrangement, while the dodecyl chains are interdigitated. Concerning the liquid-crystalline behavior, the N atom in *ortho* position relative to the azo group introduces the conformational distortion of the azopyridine fragment, enabling the formation of nematic and smectic A phases.

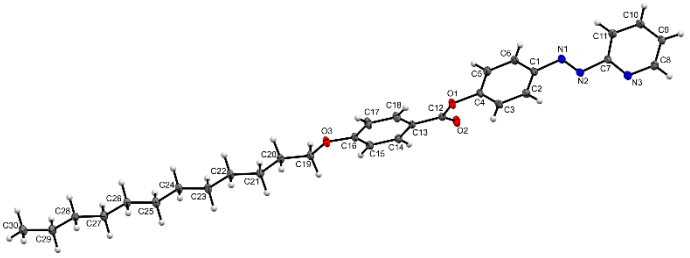


Figure 1. ORTEP presentation of the title compound.

Acknowledgement: This research was funded by the Ministry of Science, Technological Development, and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-33/2026-03/200026, 451-03-34/2026-03/200135 and 451-03-33/2026-03/200287).

УТИЦАЈ ПАРАМЕТАРА СИНТЕЗЕ НА СТРУКТУРНА И АНТИБАКТЕРИЈСКА СВОЈСТВА α-Bi_2O_3 ЧЕСТИЦА

Марија Шуљагић [a] https://orcid.org/0000-0001-7562-1715,
Љубица Анђелковић [a] https://orcid.org/0000-0001-5971-5383,
Вукосава Живковић Радовановић [b] https://orcid.org/0000-0003-2558-4957,
Александар Кременовић [c] https://orcid.org/0000-0001-8845-2332,
Владимир Павловић [d] https://orcid.org/0000-0002-1138-0331,
Милош Огњановић [e] https://orcid.org/0000-0003-2889-4416

[a] *Универзитет у Београду, Институт за хемију технологију и металургију, Институт од националног значаја за Републику Србију, Његошева 12, Београд, Србија;* [b] *Универзитет у Београду, Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија;* [c] *Универзитет у Београду, Рударско-геолошки факултет, Ђушина 7, Београд, Србија;* [d] *Универзитет у Београду, Пољопривредни факултет, Немањина 6, Београд-Земун, Србија;* [e] *Универзитет у Београду, Институт за нуклеарне науке „Винча“, Институт од националног значаја за Републику Србију, Мике Петровића Аласа 12-14, Београд, Србија*
e-mail: marija.suljagic@ihtm.bg.ac.rs

Због пораста броја бактерија отпорних на антибиотике, бизмут-оксид се истиче као неорганski кандидат захваљујући биокомпатибилности и вишеструком бактерицидном дејству. У овом раду, прахови α-Bi_2O_3 добијени су термалном декомпозицијом бизмут-оксикарбоната и реверзном копреципитацијом. Рендгенска дифракција на праху потврдила је присуство моноклиничне α-Bi_2O_3 фазе у свим узорцима (просторна група $P2_1/c$), са параметрима јединичне ћелије који су у сагласности са литературним вредностима. Анализа величине кристалита и микронапрезања *Williamson–Hall* методом показала је раст величине кристалита од ~540 Å на 350 °C до ~1390 Å (копреципитација на 80 °C уз накнадно жарење). Копреципитација је дала вишу кристаличност него термална декомпозиција на упоредивим температурама. Фазна „чистоћа“ узорака такође расте са температуром: узорак обрађен на најнижој температури садржи свега ~50 % α-Bi_2O_3 поред β-Bi_2O_3 и остатака прекурсора, док узорци процесирани на 80 °C или више достижу потпуну конверзију у α- Bi_2O_3 фазу. FTIR је потврдио уклањање карбонатних и нитратних остатака, док је електронска микроскопија показала зрнасте субмикрометарске честице (декомпозиција) и микроштапиће од 5–20 μm (копреципитација). Сви узорци показали су снажно бактерицидно дејство према *E. coli* (>80 % редукције колонија за 4 h), најизраженије код узорака високе фазне „чистоћом“ и мањим честицама, док је *S. aureus* био знатно отпорнији услед дебелог пептидогликанског омотача [1]. Даља оптимизација димензија честица, у комбинацији са фотокаталитичком активацијом, могла би отворити пут ка примени α-Bi_2O_3 као ефикасног широкоспектралног антимикробног агенса.

[1] L. Andjelković, V. Ž. Radovanović, V. Pavlović, A. Kremenović, V. Uskoković, M. Ognjanović, M. Šuljagić, *Inorg. Chem. Commun.*, **188** (2026) 116612.

INFLUENCE OF SYNTHESIS PARAMETERS ON STRUCTURAL AND ANTIBACTERIAL PROPERTIES OF α-Bi_2O_3 PARTICLES

Marija Šuljagić [a] https://orcid.org/0000-0001-7562-1715,
Ljubica Anđelković [a] https://orcid.org/0000-0001-5971-5383,
Vukosava Živković Radovanović [b] https://orcid.org/0000-0003-2558-4957,
Aleksandar Kremenović [c] https://orcid.org/0000-0001-8845-2332,
Vladimir Pavlović [d] https://orcid.org/0000-0002-1138-0331,
Miloš Ognjanović [e] https://orcid.org/0000-0003-2889-4416

[a] *University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia;* [b] *University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Studentski Trg 12-16, Belgrade, Serbia;* [c] *University of Belgrade, Faculty of Mining and Geology, Djušina 7, Belgrade, Serbia;* [d] *University of Belgrade, Faculty of Agriculture, Nemanjina 6, Belgrade-Zemun, Serbia;* [e] *University of Belgrade, "VINČA" Institute of Nuclear Sciences, National Institute of the Republic of Serbia, Mike Petrovića Alasa 12-14, Belgrade, Serbia*
e-mail: marija.suljagic@ihtm.bg.ac.rs

As bacterial resistance to antibiotics rises, bismuth oxide stands out among inorganic candidates owing to its favorable biocompatibility and multi-target bactericidal action. In this work, α-Bi_2O_3 powders were obtained by thermal decomposition of bismuth oxycarbonate and reverse coprecipitation. X-ray powder diffraction analysis confirmed the monoclinic α-Bi_2O_3 phase (space group $P2_1/c$), with the determined lattice parameters in good agreement with previously reported literature values. Williamson–Hall size–strain analysis revealed a progressive increase in crystallite size from ~540 Å at 350 °C to ~1390 Å (coprecipitation at 80 °C followed by annealing). Coprecipitation yielded higher crystallinity than thermal decomposition at comparable temperatures. Phase purity also improved with temperature: the lowest-temperature sample contained only ~50 % α-Bi_2O_3 alongside β-Bi_2O_3 and residual precursor, whereas samples processed at 80 °C or above achieved full α- Bi_2O_3 phase conversion. FTIR confirmed the gradual elimination of carbonate and nitrate residues, while electron microscopy showed sub-micrometre irregular grains (decomposition) and 5–20 μm microrods (coprecipitation). All samples exhibited strong bactericidal activity toward *E. coli* (>80 % colony reduction within 4 h), most pronounced for samples with high α-phase content and small particle size, whereas *S. aureus* proved more resistant owing to its thick peptidoglycan wall [1]. Further optimization of particle dimensions, combined with photocatalytic activation, could pave the way toward deploying α-Bi_2O_3 as an effective broad-spectrum antimicrobial agent.

[1] L. Andjelković, V. Ž. Radovanović, V. Pavlović, A. Kremenović, V. Uskoković, M. Ognjanović, M. Šuljagić, *Inorg. Chem. Commun.*, **188** (2026) 116612.

ФОРМИРАЊЕ МОНОНУКЛЕАРНОГ КОМПЛЕКСА НИКЛА(II) СА 2-АЦЕТИЛТИАЗОЛ СЕМИКАРБАЗОНОМ ПОТПОМОГНУТО ТИОЦИЈАНАТОМ: СИНТЕЗА, КРИСТАЛНА СТРУКТУРА И ИЦ АНАЛИЗА

Теодора Витомиров [a] https://orcid.org/0000-0002-0549-6450,
Мима Јевтовић [b] https://orcid.org/0000-0001-6039-5452,
Невена Стевановић [a] https://orcid.org/0000-0002-6906-207X,
Маја Шумар Ристовић [a] https://orcid.org/0000-0002-2733-8955

[a] *Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија;* [b] *Иновациони центар Хемијског факултет д.о.о, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија*
e-mail: majas@chem.bg.ac.rs

Кондензационом реакцијом 2-ацетилтиазола и семикарбазида хидрохлорида у киселој средини добијен је нови лиганд ((*E*)-2-(1-(тиазол-2-ил)етилиден)хидразин-1-карбоксамид, H**L**) који је структурно окарактерисан ИЦ и НМР спектроскопијом. У директној синтези лиганд је реаговао са $Ni(BF_4)_2 \cdot 6H_2O$ и амонијум-тиоцијанатом и добијен је нови мононуклеарни Ni(II) комплекс $[NiH\mathbf{L}(NSC)_2MeOH] \cdot H\mathbf{L} \cdot H_2O$. Комплекс је структурно окарактерисан ИЦ и УЉ/ВИС спектроскопијом и рендгенском структурном анализом. На основу података добијених рендгенском структурном анализом установљено је да комплекс кристалише у моноклиничном кристалном систему и припада просторној групи $P2_1/c$, при чему се лиганд координује тридентанто за централни метални јон Ni(II) преко NNO - донорског сета атома, градећи притом два петочлана хелатна прстена са Ni(II) као централним металним јоном. Преостала координациона места заузимају два тиоцијанатна лиганда и један молекул метанола, формирајући дисторговану октаедарску геометрију око централног металног јона. Координовани молекул метанола учествује у грађењу водоничних веза које доприносе стабилизацији комплекса у кристалном паковању. У спољашњој сфери комплекса налази се један молекул воде и молекул лиганда H**L**.

Захвалница: Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије, Евиденциони бројеви: 451-03-33/2026-03/200168, 451-03-33/2026-03/200288

THIOCYANATE-ASSISTED FORMATION OF A MONONUCLEAR NICKEL(II) COMPLEX WITH A 2-ACETYLTHIAZOLE SEMICARBAZONE: SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURE AND IR ANALYSIS

Teodora Vitomirov [a] https://orcid.org/0000-0002-0549-6450,
Mima Jevtović [b] https://orcid.org/0000-0001-6039-5452,
Nevena Stevanović [a] https://orcid.org/0000-0002-6906-270X,
Maja Šumar Ristović [a] https://orcid.org/0000-0002-2733-8955

[a] *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia;* [b] *Innovative Centre of the Faculty of Chemistry ltd, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia*
e-mail: majas@chem.bg.ac.rs

A novel 2-acetylthiazole semicarbazone ligand ((*E*)-2-(1-(thiazol-2--yl)ethylidene)hydrazine-1-carboxamide, H**L**) was obtained in the reaction of semicarbazide hydrochloride and 2-acetylthiazole in aqueous acidic medium and structurally characterized by IR and NMR spectroscopy. The ligand was then used in the reaction with $Ni(BF_4)_2 \cdot 6H_2O$ and ammonium thiocyanate to form a new mononuclear Ni(II) complex $[NiH\mathbf{L}(NSC)_2MeOH] \cdot H\mathbf{L} \cdot H_2O$. Characterization of the complex was done by using IR, UV/VIS spectroscopy and single-crystal X-ray diffraction. The complex adopts a monoclinic arrangement in the $P2_1/c$ space group where H**L** binds in a tridentate NNO mode, forming two five-membered chelate rings. The remaining coordination sites are occupied by two thiocyanate ligands and one methanol molecule, forming a distorted octahedral geometry. The coordinated methanol molecule participates in hydrogen bonding, contributing to stabilization of both the local coordination environment and the extended crystal packing. The outer sphere of the complex contains one water molecule and one ligand molecule H**L**.

Acknowledgement: Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia, Contract numbers: 451-03-33/2026-03/200168, 451-03-33/2026-03/20028

THE ORIGIN OF SUPERSTRUCTURE REFLECTIONS IN BIOGENIC, GEOLOGICAL, SPELEOTHEM, AND SYNTHETIC ARAGONITE

Aleksander Rečnik [a] https://orcid.org/ 0000-0002-6636-8591,
Vesna Ribić [a] https://orcid.org/ 0000-0001-8185-7433,
Zsombor Molnár [b] https://orcid.org/ 0000-0002-9836-3488,
Péter Pekker [b] https://orcid.org/ 0000-0002-0463-0742,
Péter Németh [c,d] https://orcid.org/ 0000-0001-5592-5877,
István Dódony [b] https://orcid.org/ 0000-0002-5710-0657,
Mihály Pósfai [b] https://orcid.org/ 0000-0001-9355-3533,
Pavel N. Gavryushkin [e] https://orcid.org/ 0000-0002-9419-2167

[a] *Jožef Stefan Institute, Department for Nanostructured Materials, Ljubljana, Slovenia;* [b] *University of Pannonia, Research Institute of Biomolecular and Chemical Engineering, Nanolab, Veszprém, Hungary;* [c] *HUN-REN-PE Environmental Mineralogy Research Group, Veszprém, Hungary;* [d] *Institute for Geological and Geochemical Research, HUN-REN Research Centre for Astronomy and Earth Sciences (MTA Centre of Excellence), Budapest, Hungary;* [e] *V.S. Sobolev Institute of Geology and Mineralogy, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia*
e-mail: aleksander.recnik@ijs.si

Superstructure and symmetry–forbidden reflections in aragonite ($CaCO_3$) have puzzled crystallographers for over half a century. They occur across all samples of biogenic, geological, speleothem, and synthetic origin. These enigmatic diffraction features have long hinted at the unknown structural complexities, sparking speculations about new polytypes and unknown phases. By combining electron diffraction methods, structure modeling, and simulations of dynamic electron–wave scattering and propagation, we demonstrate that these reflections arise from nanoscale twinning that is present, but commonly disregarded, in all low–pressure aragonites regardless of their origin or purity. We resolve this longstanding debate by demonstrating that these reflections are nothing but artifacts of double diffraction caused by the intrinsic twinning of aragonite. Contrary to previous assumptions, and despite the high density of twinning, we find no evidence of ordered twin–based polytypes of aragonite. Our findings unify decades of conflicting observations, providing a comprehensive explanation for such reflection artifacts and offers a framework for identifying similar diffraction anomalies in other twinned materials.

IN MEMORIAM

Др Anne Spasojević-de Biré, професор (1960 – 2025)



Августа 2025. године преминула је наша драга колегиница Anne Spasojević-de Biré. Др Anne Spasojević-de Biré рођена је 7. јула 1960. године у Француској. Дипломирала је хемију на Универзитету Пјер и Марија Кири у Паризу 1985. године, а докторирала је 1989. године. Током постодокторског усавршавања бавила се проучавањем дифракције поларизованих неутрона у суперпроводницима. Након тога, добила је стално место у Ecole Centrale Paris, а у истој институцији је изабрана у звање редовног професора. Током своје богате академске каријере оставила је дубок траг у области хемије, кристалографије и науке о материјалима. Њена научна радозналост, посвећеност истраживању и изузетна стручност резултирали су бројним научним доприносима и међународним пројектима. Резултати њених истраживања објављени су у 78 публикација и цитирани преко 1200 пута.

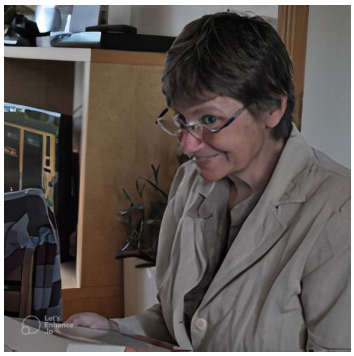
Изузетно важан део њене каријере представљао је рад у настави у чему је такође била веома успешна. За свој допринос науци и образовању добила је многобројне награде.

Посебно место у њеном раду заузимала је сарадња са истраживачима из Србије. Током више од три деценије развијала је и неговала снажне научне везе са бројним институцијама у нашој земљи, несебично делећи своје знање, искуство и ентузијазам. Многим колегама била је ментор, сарадник и пријатељ. Била је веома активна у раду Српског кристалографског друштва и радо виђен гост на свим скуповима Друштва. 2018. године проглашена је за почасног члана СКД.

Иза себе је оставила четворо деце и троје унучади.

Са дубоким поштовањем и захвалношћу,
Чланови Српског кристалографског друштва

Dr. Anne Spasojević-de Biré, Professor (1960 – 2025)



In August 2025, our dear colleague Dr Anne Spasojević-de Biré passed away. Dr Anne Spasojević-de Biré was born on 7 July 1960 in France. She obtained a degree in chemistry at the University Pierre and Marie Curie in Paris in 1985 and obtained her PhD in 1989. During her postdoctoral studies, she worked on the investigation of polarized neutron diffraction on superconductor compounds. She subsequently obtained a permanent position at Ecole Centrale Paris, where she was later promoted to Full Professor. Throughout her distinguished academic career, she left a profound mark on the fields of chemistry, crystallography, and materials science. Her scientific curiosity, dedication to research, and exceptional expertise resulted in numerous scientific contributions and international collaborations. The results of her research were published in 78 scientific papers and cited more than 1,200 times.

Teaching and education constituted an exceptionally important part of her career, in which she was equally successful. In recognition of her contributions to science and education, she received numerous awards and distinctions.

A special place in her work was occupied by her collaboration with researchers from Serbia. For more than three decades, she developed and nurtured strong scientific ties with many institutions in our country, generously sharing her knowledge, experience, and enthusiasm. To many colleagues, she was a mentor, collaborator, and friend. She was highly active in the Serbian Crystallographic Society and a welcome guest at all Society meetings. In 2018, she was elected an Honorary Member of the Serbian Crystallographic Society. She is survived by her four children and three grandchildren.

With deep respect and gratitude,
Members of the Serbian Crystallographic Society

CIP - Каталогизација у публикацији
Народна библиотека Србије, Београд

548/549(048)

СРПСКО кристалографско друштво. Конференција (30 ; 2026 ; Београд)
Изводи радова / XXX конференција Српског кристалографског друштва, Београд; [организатор] Српско кристалографско друштво ; [уредник Ивана Вељковић] = Book of Abstracts / 30th Conference of the Serbian Crystallographic Society, Belgrade 2026.; [organizer] Serbian Crystallographic Society ; [editor Ivana Veljković]. - Београд : Српско кристалографско друштво = Belgrade : Serbian Crystallographic Society, 2026 (Београд : Лампас = Beograd : Lampas). - XV, 120 стр. : илустр. ; 24 cm. - ([Изводи радова - Српско кристалографско друштво], ISSN 0354-5741)

Апстракти упоредо на срп. и енгл. језику. - Текст ћир. и лат. - Тираж 90. - Библиографија уз већину апстраката.

ISBN 978-86-912959-8-1

a) Кристалографија -- Апстракти b) Минералогија -- Апстракти

COBISS.SR-ID 196217353