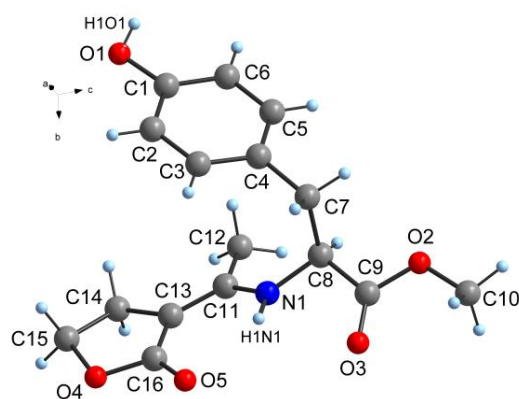


СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

XXII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА  
Изводи радова

22<sup>nd</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY  
Abstracts



Смедерево-Smederevo  
2015

XXII КОНФЕРЕНЦИЈАСРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА  
Изводи радова

22<sup>nd</sup> CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY  
Abstracts

Издавач – Publisher:

Српско кристалографско друштво  
Ђушина 7, 11000 Београд, тел./факс: 2635-217  
Serbian Crystallographic Society  
Đušina 7, 11000 Belgrade, Serbia, phone/fax: 381-11-2635-217

За издавача – For the publisher:

Срећко Трифуновић – Srećko Trifunović

Уредник – Editor:

Срећко Трифуновић – Srećko Trifunović

Технички уредник – Technical editor:

Верица Јевтић – Verica Jevtić

уз помоћ – with help of:

Данијела Стојковић – Danijela Stojković  
Гордана Радић – Gordana Radić

Издавање ове публикације омогућено је финансијском помоћи Природно-  
-математичког факултета, Универзитета у Крагујевцу.

This publication is financially supported by the Faculty of Science, University of  
Kragujevac.

Српско кристалографско друштво – Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-2-9

Штампа – Printing

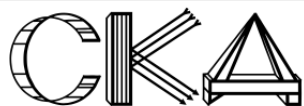
Копирница ДУГА

Крагујевац - Kragujevac

Тираж – Copies: 70

Крагујевац – Kragujevac

2015



SRPSKO KRISTALOGRAFSKO DRUŠTVO  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**XXII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**22<sup>nd</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**Научни одбор – Scientific Committee:**

др Дејан Полети, ТМФ, Београд - Dr. Dejan Poleti, TMF, Belgrade  
др Јелена Роган, ТМФ, Београд - Dr. Jelena Rogan, TMF, Belgrade  
др Љиљана Карановић, РГФ, Београд - Dr. Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade  
др Александар Кременовић, РГФ, Београд - Dr. Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade  
др Предраг Вулић, РГФ, Београд - Dr. Predrag Vulić, RGF, Belgrade  
др Агнеш Капор, ПМФ, Нови Сад - Dr. Agneš Kapor, PMF, Novi Sad  
др Срђан Ракић, ПМФ, Нови Сад - Dr. Srđan Rakić, PMF, Novi Sad  
др Оливера Клисурић, ПМФ, Нови Сад - Dr. Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad  
др Снежана Зарић, ХФ, Београд - Dr. Snežana Zarić, HF, Belgrade  
др Братислав Антић, ИНН „ВИНЧА”, Београд - Dr. Bratislav Antić, INN „VINČA”, Belgrade  
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА”, Београд - Dr. Goran Bogdanović, INN „VINČA”, Belgrade  
др Слађана Новаковић, ИНН „ВИНЧА”, Београд - Dr. Slađana Novaković, INN „VINČA”, Belgrade

**Организациони одбор – Organizing Committee:**

Срећко Трифуновић, ПМФ, Крагујевац – Srećko Trifunović, Faculty of Science, Kragujevac  
Верица Јевтић, ПМФ, Крагујевац - Verica Jevtić, Faculty of Science, Kragujevac  
Гордана Радић, Факултет Медицинских наука, Крагујевац – Gordana Radić, Faculty of Medical Sciences, Kragujevac  
Данијела Стојковић, ПМФ, Крагујевац – Danijela Stojković, Faculty of Science, Kragujevac

## KRISTALNA STRUKTURA NOVOG HETERONUKLEARNOG POLIMERA $[\text{Cu}_2\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_4\text{O}_4)_3(\text{C}_{10}\text{H}_9\text{N}_3)_2]_n$

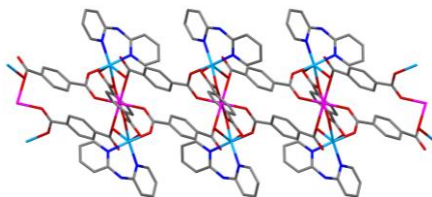
**L. Radovanović<sup>a</sup>, J. Rogan<sup>b</sup>, D. Poleti<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11000 Beograd, Srbija; <sup>b</sup>Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11000 Beograd, Srbija  
e-mail: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

U proteklih nekoliko godina intenzivno se ispituje ideja o heterometalnim koordinacionim jedinjenjima, zbog mogućnosti da se uvođenjem različitih prelaznih metala poboljšaju katalitička, magnetna, fotoluminiscentna i druga svojstva materijala [1]. Kao doprinos tome, predstavljamo sintezu i kristalnu strukturu heteronuklearnog kompleksa sa jonima  $\text{Cu}^{2+}$  i  $\text{Mn}^{2+}$ , anjonom 1,4-benzendikarboksilne kiseline (tereftalne kiseline,  $\text{H}_2\text{tpht}$ ) i 2,2'-dipiridilaminom (dipya) kao terminalnim ligandom.

Polimerni kompleks  $[\text{Cu}_2\text{Mn}(\text{dipya})_2(\text{tpht})_3]_n$  dobijen je hidrotermalnom metodom u čeličnom autoklavu sa teflonskom oblogom (zagrevanje na  $160\text{ }^\circ\text{C}$  tokom 4 dana i hlađenje do sobne temperature tokom 8 h). Multidentatni načini koordinacije tpht liganada, prikazani na shemi, veoma su složeni: tpht1 je koordiniran kao bis-helat i bis-monomost, dok je tpht2 kombinovani, bidentatni i monomostovni ligand, a oba liganda zajedno učestvuju u formiranju polimernih slojeva paralelnih sa  $bc$ -ravni. Geometrija oko oba atoma, i  $\text{Mn}^{2+}$  i  $\text{Cu}^{2+}$ , može se opisati kao oktaedarska, s tim da je oktaedar oko  $\text{Cu}^{2+}$  značajno deformisan. Slojevi su stabilizovani nekovalentnim  $\text{C-H}\cdots\pi$  interakcijama ( $\text{H}\cdots\text{Cg}$  rastojanje iznosi  $2,834\text{ \AA}$ ) između H-atoma sa prstena jednog dipya liganada i susednog aromatičnog prstena u sloju. Intermolekulskim vodoničnim vezama, uspostavljenim između aminskeg H-atoma i nekoordiniranog O-atoma koji pripada tpht2, slojevi su povezani u 3D strukturu.

Osnovni kristalografski podaci kompleksa jesu:  $\text{C}_{44}\text{H}_{30}\text{Cu}_2\text{MnN}_6\text{O}_{12}$ ,  $M_r = 1016,78$ , rombični sistem, prostorna grupa  $Pbca$ ,  $a = 10,901(2)$ ,  $b = 16,032(3)$ ,  $c = 23,843(5)\text{ \AA}$ ,  $V = 4167(1)\text{ \AA}^3$ ,  $Z = 4$ ,  $F(000) = 2060$ ,  $\rho_x = 1,621\text{ g cm}^{-3}$ ,  $\mu(\text{Mo K}\alpha) = 1,384\text{ mm}^{-1}$ . Utačnjavanje sa  $F^2$  (303 parametra) dalo je  $R_1 = 0,0305$ ,  $wR_2 = 0,0702$ ,  $S = 1,048$  za sve podatke, i  $R_1 = 0,0269$  za 3729 refleksija sa  $I \geq 2\sigma(I)$ .



Slika. Projekcija polimernog sloja na  $bc$ -ravan

[1] O. Kozachuk, K. Khaletskaya, M. Halbherr, A. Bétard, M. Meilikhov, R. W. Seidel, B. Jee, A. Pöpl, R. A. Fisher, Eur. J. Inorg. Chem. (2012) 1688-1695

# CRYSTAL STRUCTURE OF HETERONUCLEAR COORDINATION POLYMER $[\text{Cu}_2\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_4\text{O}_4)_3(\text{C}_{10}\text{H}_9\text{N}_3)_2]_n$

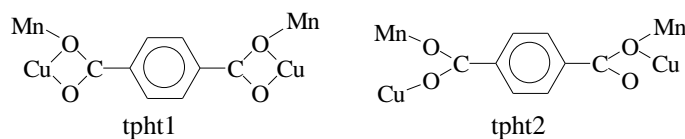
**L. Radovanović<sup>a</sup>, J. Rogan<sup>b</sup>, D. Poleti<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Innovation Centre of Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia; <sup>b</sup>Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia  
e-mail: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

In the past several years, the concept of heterometallic coordination compounds has been increasingly investigated due to opportunity to incorporate different transition metal centers in supramolecular materials to enhance their catalytic, magnetic, photoluminescent and other properties [1]. In this contribution, we present the synthesis and crystal structure of a heteronuclear complex containing  $\text{Cu}^{2+}$  and  $\text{Mn}^{2+}$  ions with anion of 1,4-benzenedicarboxylic acid (terephthalic acid,  $\text{H}_2\text{tpht}$ ) and terminal 2,2'-dipyridylamine (dipya) ligand.

The polymeric  $[\text{Cu}_2\text{Mn}(\text{dipya})_2(\text{tpht})_3]_n$  complex has been prepared by the hydrothermal method in a Teflon-lined steel autoclave (at 160 °C for 4 days and cooled to room temperature for 8 h). The multidentate coordination modes of tphts, presented in Scheme, are very complex: tpht1 is coordinated as bis-chelate and bis-monobridge, while tpht2 is combined, bidentate and monobridge ligand, making together polymeric layers parallel to the *bc*-plane. The geometry around both  $\text{Mn}^{2+}$  and  $\text{Cu}^{2+}$  can be described as octahedral, wherein the  $\text{Cu}^{2+}$  octahedron is highly deformed. The layers are stacked by non-covalent  $\text{C}-\text{H}\cdots\pi$  interactions ( $\text{H}\cdots\text{Cg}$  distance is 2.834 Å) formed between H atom from one pyridyl ring of dipya and adjacent ring in the layer. By intermolecular hydrogen bonds between amine H atom from dipya and non-coordinated O atom from tpht2, the layers are connected into the 3D structure.

The main crystallographic data for the titled complex are:  $\text{C}_{44}\text{H}_{30}\text{Cu}_2\text{MnN}_6\text{O}_{12}$ ,  $M_r = 1016.78$ , orthorhombic, space group *Pbca*,  $a = 10.901(2)$ ,  $b = 16.032(3)$ ,  $c = 23.843(5)$  Å,  $V = 4167(1)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $F(000) = 2060$ ,  $\rho_x = 1.621$  g cm<sup>-3</sup>,  $\mu(\text{Mo } K\alpha) = 1.384$  mm<sup>-1</sup>. The refinement on  $F^2$  (303 parameters) yielded  $R_1 = 0.0305$ ,  $wR_2 = 0.0702$ ,  $S = 1.048$  for all data, and  $R_1 = 0.0269$  for 3729 observed reflections with  $I \geq 2\sigma(I)$ .



Scheme. The coordination modes of tpht anions in  $[\text{Cu}_2\text{Mn}(\text{dipya})_2(\text{tpht})_3]_n$

[1] O. Kozachuk, K. Khaletskaya, M. Halbherr, A. Bétard, M. Meilikhov, R. W. Seidel, B. Jee, A. Pöpl, R. A. Fisher, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2012) 1688-1695.