

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

XXVI КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

26th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Abstracts

Сребрно језеро – Silver Lake
2019.

XXVI КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

26th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Abstracts

Издавач - Publisher:

– Српско кристалографско друштво

Ђушина 7, 11000 Београд, Србија, тел. 011-3336-701

– Serbian Crystallographic Society

Đušina 7, 11 000 Belgrade, Serbia, phone: +381 11 3336 701

За издавача – For the publisher:

Јелена Роган – Jelena Rogan

Уредник – Editor:

Александра Дапчевић – Aleksandra Dapčević

Технички уредник – Technical editor:

Лидија Радовановић – Lidija Radovanović

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

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

© Српско кристалографско друштво – Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-5-0

ISSN 0354-5741

Штампа – Printing:

Технолошко-металуршки факултет, Развојно-истраживачки центар Графичког инжењерства, Карнегијева 4, Београд, Србија

Faculty of Technology and Metallurgy, Research and Development Centre of Printing Technology, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

Тираж – Copies: 100

Београд – Belgrade

2019.

**XXVI КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**26th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:

др Љиљана Карановић, РГФ Београд / dr Ljiljana Karanović, RGF Beograd
др Оливера Клисурић, ПМФ Нови Сад / dr Olivera Klisurić, PMF Novi Sad
др Марко Родић, ПМФ Нови Сад / dr Marko Rodić, PMF Novi Sad
др Срећко Трифуновић, ПМФ Крагујевац / dr Srećko Trifunović, PMF Kragujevac
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, TMF Beograd
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА” / dr Goran Bogdanović, INN "Vinča"
др Наташа Јовић-Орсини, ИНН „ВИНЧА” / dr Nataša Jović-Orsini, INN "Vinča"
др Снежана Зарић, ХФ Београд / dr Snežana Zarić, HF Beograd
др Катарина Анђелковић, ХФ Београд / dr Katarina Anđelković, HF Beograd
др Братислав Антић, ИНН „ВИНЧА” / dr Bratislav Antić, INN "Vinča"
др Мирјана Милић, ИНН „ВИНЧА” / dr Mirjana Milić, INN "Vinča"
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, TMF Beograd
др Предраг Вулић, РГФ Београд / dr Predrag Vulić, RGF Beograd
др Тамара Тодоровић, ХФ Београд / dr Tamara Todorović, HF Beograd
др Слађана Новаковић, ИНН „ВИНЧА” / dr Slađana Novaković, INN "Vinča"
др Сабина Ковач, РГФ Београд / dr Sabina Kovač, RGF Beograd
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, RGF Beograd

ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZATION COMMITTEE:

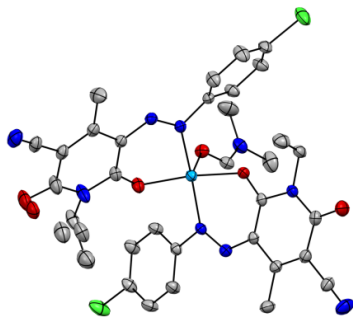
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, RGF Beograd
др Предраг Вулић, РГФ Београд / dr Predrag Vulić, RGF Beograd
др Сабина Ковач, РГФ Београд / dr Sabina Kovač, RGF Beograd
маст. геол. Предраг Дабић, РГФ Београд / Predrag Dabić, RGF Beograd
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, TMF Beograd
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, TMF Beograd
др Лидија Радовановић, ИЦ ТМФ Београд / dr Lidiја Radovanović, IC TMF Beograd
Војана Симовић, дипл. инж, ИМСИ Београд / Voјana Simović, IMSI Beograd

KRISTALNA STRUKTURA, SPEKTRALNA I TERMALNA SVOJSTVA Cu(II)-KOMPLEKSA AZO PIRIDONSKE BOJE

J. Ladarević^a, L. Radovanović^b, B. Božić^c, A. Mašulović^a, J. Rogan^a, D. Mijin^a

^a Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija; ^b Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija; ^c Institut za Fiziologiju i Biohemiju, Biološki fakultet, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 16, Beograd, Srbija
e-mail: jmirkovic@tmf.bg.ac.rs

Heterociklične azo boje koje u svojoj strukturi imaju piridonsko jezgro pokazale su se kao efikasni helatni ligandi pri formiranju bakar(II)-kompleksa [1]. Kompleksi azo piridonskih boja primenjuju se u optičkim slojevima za snimanje i karakterišu se dobrom stabilnošću na uticaj svetlosti i povišene temperature [2]. Azo-hidrazon tautomerija predstavlja značajan fenomen pri kompleksiranju ovih boja sa jonima prelaznih metala, zbog transformacije hidrazonskog mosta u bojama u azo-vezu u kompleksu.



Slika 1. Asimetrična jedinica Cu(II)-kompleksa. Nekoordinirani molekul DMF i H-atomi nisu prikazani.

Asimetričnu jedinicu kompleksa čine Cu(II)-atom, dva helatna L-liganda, jedan koordiniran i jedan nekoordiniran molekul DMF (slika 1). Kvadratno-piramidalno okruženje Cu(II)-atoma čine dva O-atoma i dva N-atoma iz dva molekula L-liganda i O-atom iz koordiniranog molekula DMF. Stabilizacija kristalne strukture postignuta je slabim nekovalentnim interakcijama: C–H···O/N, π – π , C–H··· π , slobodan elektronski par– π i Cl···Cl.

Kristalografski podaci: C₃₆H₃₈N₁₀O₆Cl₂Cu, $M_r = 841,20$, trikliničan sistem, prostorna grupa $P\bar{1}$, $a = 10,109(5)$, $b = 11,753(6)$, $c = 17,447(8)$ Å, $\alpha = 74,152(4)$, $\beta = 85,600(4)$, $\gamma = 77,357(4)$ °, $V = 1945,41(17)$ Å³, $R_1 = 0,059$ za 5929 refleksija sa $I \geq 2\sigma(I)$.

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

[2] X. Chen, Y. Wang, T. Tao, J. Geng, W. Huang, H. Qian, *Dalton Trans.*, **42** (2013) 7679–7692.

CRYSTAL STRUCTURE, SPECTRAL AND THERMAL PROPERTIES OF Cu(II) COMPLEX OF AZO PYRIDONE DYE

J. Ladarević^a, L. Radovanović^b, B. Božić^c, A. Mašulović^a, J. Rogan^a, D. Mijin^a

^a Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia; ^b Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia; ^c Institute of Physiology and Biochemistry, Faculty of Biology, University of Belgrade, Studentski trg 16, Blegrade, Serbia
e-mail: jmirkovic@tmf.bg.ac.rs

Heterocyclic azo dyes bearing pyridone ring as a coupling constituent are recognized as efficient chelating agents for copper(II) [1]. Complexes of azo pyridone dyes find application in optical recording layers with improved light stability and are characterized by good thermal and light stability [2]. Azo-hydrazone tautomerism of these dyes is evidenced as the significant phenomenon in their coordination since hydrazone bridge in dyes transforms to azo bond upon complexation.

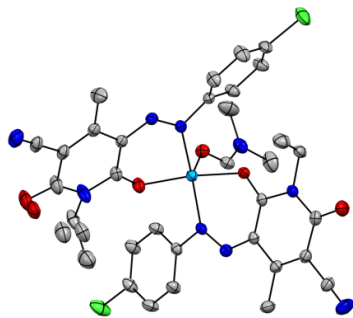


Figure 1. Asymmetric unit of Cu(II) complex. Noncoordinated molecule of DMF and H atoms are not presented.

In the reaction of 5-(4-chlorophenylazo)-1-ethyl-3-cyano-6-hydroxy-4-methyl-2-pyridone (HL) with $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ in *N,N*-dimethylformamide (DMF) at room temperature, a complex $[\text{CuL}_2(\text{DMF})] \cdot \text{DMF}$ has been prepared. The complex is characterized by UV-Vis and ATR-FTIR spectroscopy, simultaneous TG/DSC and single-crystal X-ray analysis.

The asymmetric unit of the complex is comprised of one Cu(II) atom, two chelate L ligands, one coordinated and one noncoordinated DMF molecule (Figure 1). Cu(II) atom is surrounded by two O and two N atoms from two L ligands and by one O atom from coordinated DMF, forming a square pyramidal environment. The stabilization of the crystal packing is achieved by weak non-covalent interactions: $\text{C}-\text{H} \cdots \text{O}/\text{N}$, $\pi-\pi$, $\text{C}-\text{H} \cdots \pi$, lone pair- π and $\text{Cl} \cdots \text{Cl}$.

Crystal data: $\text{C}_{36}\text{H}_{38}\text{N}_{10}\text{O}_6\text{Cl}_2\text{Cu}$, $M_r = 841.20$, triclinic, space group $P \bar{1}$,

$a = 10.109(5)$, $b = 11.753(6)$, $c = 17.447(8)$ Å, $\alpha = 74.152(4)$, $\beta = 85.600(4)$, $\gamma = 77.357(4)$ °, $V = 1945.41(17)$ Å³, $R_1 = 0.059$ for 5929 observed reflections with $I \geq 2\sigma(I)$.

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

[2] X. Chen, Y. Wang, T. Tao, J. Geng, W. Huang, H. Qian, *Dalton Trans.*, **42** (2013) 7679–7692.