

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

XXI КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

21<sup>st</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Abstracts



Ужице – Užice  
2014

XXI KONFERENCIJA SRPSKOG KRISTALOGRAFSKOG DRUŠTVA  
Изводи радова

21<sup>st</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:  
Дејан Полети – Dejan Poleti

Уредник – Editor:  
Дејан Полети – Dejan Poleti

Технички уредник – Technical editor:  
Александра Дапчевић – Aleksandra Đapčević

уз помоћ – with help of:  
Сабине Ковач – Sabina Kovač  
Лидије Радовановић – Lidija Radovanović  
Бојане Симовић – Bojana Simović

Издавање ове публикације омогућено је финансијском помоћи Министарства  
просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије  
This publication is financially supported by the Ministry of Education, Science and  
Technology of the Republic of Serbia

© Српско кристалографско друштво – Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-1-2

Штампа – Printing:  
Развојно-истраживачки центар графичког инжењерства  
Технолошко-металуршког факултета  
Београд, Карнегијева 4  
Research & Development Center of Graphical Engineering  
Faculty of Technology and Metallurgy  
Belgrade, Karnegijeva 4

Тираж – Copies: 100  
Београд – Belgrade  
2014



## XXI КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

### 21<sup>st</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, INS “VINČA”, Belgrade

Др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА”, Београд / Dr. Goran Bogdanović, INS “VINČA”, Belgrade

Др Слађана Новаковић, ИНН „ВИНЧА”, Београд / Dr. Slađana Novaković, INS “VINČA”, Belgrade

#### **Организациони одбор - *Organizing Committee:***

Дејан Полети, ТМФ, Београд / Dejan Poleti, TMF, Belgrade

Јелена Роган, ТМФ, Београд / Jelena Rogan, TMF, Belgrade

Александра Дапчевић, ТМФ, Београд / Aleksandra Dapčević, TMF, Belgrade

Бојана Симовић, ИМСИ, Београд / Bojana Simović, IMSI, Belgrade

Лидија Радовановић, ИЦ - ТМФ, Београд / Lidija Radovanović, IC - TMF, Belgrade

Јелена Здравковић, ИЦ - ТМФ, Београд / Jelena Zdravković, IC - TMF, Belgrade

Љиљана Карановић, РГФ, Београд / Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade

Александра Росић, РГФ, Београд / Aleksandra Rosić, RGF, Belgrade

Александар Кременовић, РГФ, Београд / Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade

Предраг Вулић, РГФ, Београд / Predrag Vulić, RGF, Belgrade

Сабина Ковач, РГФ, Београд / Sabina Kovač, RGF, Belgrade

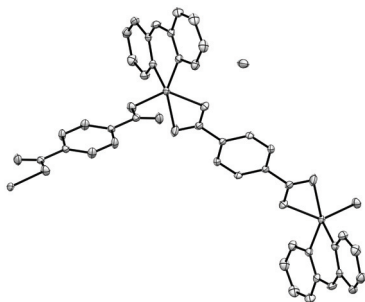
## ZIGZAG METAL-ORGANIC POLYMER: (2,2'-DIPYRIDYLAMINE)(TEREPHTHALATO)ZINC(II) HYDRATE

**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

Anions of terephthalic (1,4-benzenedicarboxylic) acid,  $\text{tpht}^{2-}$ , act as a potential polydentate and bridging ligands in metal-organic framework structures. COO groups are usually coordinated either in mono-, bi- or polydentate ways, while the simultaneous presence of two differently coordinated  $\text{tpht}$  ions is very uncommon [1]. As a continuation of our previous studies [2], the title complex has been hydrothermally synthesized and characterized by single crystal X-ray diffraction, elemental and TG/DSC analysis and FT-IR spectroscopy.

The structure (Fig. 1) consists of  $[\text{Zn}(\text{dipya})(\text{tpht})]$  complex units (dipya is 2,2'-dipyridylamine) and one solvent water molecule. There are two independent  $\text{tpht}$ : one  $\text{tpht}$  is coordinated as bis-monodentate and another as bis-chelate ligand. In this way, zigzag polymeric chains are formed (Fig. 2). The coordination geometry around Zn(II) atom can be described as deformed square pyramid. The water molecule is triply hydrogen bonded connecting even three adjacent chains and leading to the formation of 3D framework structure. Further stabilization of the structure occurs through edge-to-face C-H... $\pi$  interactions among H atom from bis-monodentate  $\text{tpht}$  in one chain and aromatic ring from bis-chelate  $\text{tpht}$  in neighboring chain ( $\text{H}\cdots\text{Cg}$  distance 2.892 Å).



Crystal data:  $\text{C}_{72}\text{H}_{60}\text{Zn}_4\text{N}_{12}\text{O}_{20}$ ,  $M_r = 1674.8$ , monoclinic, space group  $P2_1/n$ ,  $a = 9.875(2)$ ,  $b = 14.371(3)$ ,  $c = 12.264(3)$  Å,  $\beta = 95.87(3)^\circ$ ,  $V = 1731.3(6)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 1$ ,  $F(000) = 856$ ,  $\rho_x = 1.606$  g cm<sup>-3</sup>,  $\mu(\text{Mo } K\alpha) = 1.455$  mm<sup>-1</sup>. The refinement on  $F^2$  (264 parameters) yielded  $R_1 = 0.0478$ ,  $wR_2 = 0.0704$ ,  $S = 1.043$  for all data, and  $R_1 = 0.0345$  for 2604 observed reflections with  $I \geq 2\sigma(I)$ .

Figure 1. The asymmetric unit of  $\{[\text{Zn}(\text{dipya})(\text{tpht})]\cdot\text{H}_2\text{O}\}_n$ .

- [1] Y.B. Go, X. Wang, E.V. Anokhina, A.J. Jacobson, *Inorg. Chem.* **43** (2004) 5360-5367;  
J. Tao, M.L. Tong, X.M. Chen, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 2000, 3669-4674.  
[2] J. Rogan, D. Poleti, Lj. Karanović, G. Bogdanović, A. Spasojević-de Biré, D.M. Petrović, *Polyhedron*, **19** (2000) 1415-1421.

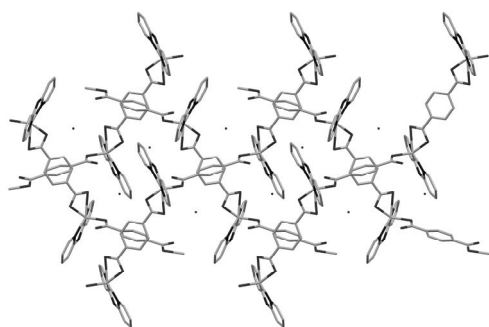
## CIK-CAK METAL-ORGANSKI POLIMER: (2,2'-DIPYRIDILAMIN)(TEREFTALATO)CINK(II)-HIDRAT

**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 metal-organskim umreženim strukturama anjoni tereftalne (1,4-benzendikarboksilne) kiseline, tpht<sup>2-</sup>, predstavljaju potencijalne polidentatne i mostovne ligande. COO<sup>-</sup>-grupe su najčešće koordinirane na mono-, bi- ili polidentatni način, dok je istovremeno prisustvo dva različito koordinirana tpht-jona veoma retko [1]. Kao nastavak naših ranijih istraživanja [2], hidrotermalnom sintezom dobijen je navedeni kompleks i okarakterisan rendgenskom strukturnom, elementarnom i TG/DSC analizom i IC-spektroskopijom.

Struktura (sl. 1) se sastoji od [Zn(dipya)(tpht)] kompleksnih jedinki (dipya je 2,2'-dipiridilamin) i nekoordiniranog molekula vode. Postoje dva nezavisna tpht liganda: jedan je koordiniran kao bis-monodentatni, a drugi kao bis-helatni ligand. Na taj način se formiraju cik-cak polimerni lanci (sl. 2). Geometrija oko atoma Zn(II) može se opisati kao deformisana kvadratna piramida. Molekul vode gradi tri vodonične veze povezujući čak tri susedna lanca i formirajući 3D strukturu. Dalja stabilizacija strukture odvija se pomoću „edge-to-face” C–H... $\pi$  interakcija između H-atoma bis-monodentatnog tpht u jednom lancu i aromatičnog prstena bis-helatnog tpht u susednom lancu (H...Cg rastojanje iznosi 2,892 Å).



*Kristalografski podaci:* C<sub>72</sub>H<sub>60</sub>Zn<sub>4</sub>N<sub>12</sub>O<sub>20</sub>,  
M<sub>r</sub> = 1674,8, monoklinični sistem,  
prostorna grupa P2<sub>1</sub>/n, a = 9,875(2),  
b = 14,371(3), c = 12,264(3) Å,  
 $\beta$  = 95,87(3)°, V = 1731,3(6) Å<sup>3</sup>, Z = 1,  
F(000) = 856,  $\rho_x$  = 1,606 g cm<sup>-3</sup>,  
 $\mu$ (Mo K $\alpha$ ) = 1,455 mm<sup>-1</sup>. Utačnjavanje sa  
F<sup>2</sup> (264 parametara) dalo je R<sub>1</sub> = 0,0478,  
wR<sub>2</sub> = 0,0704, S = 1,043 za sve podatke, i  
R<sub>1</sub> = 0,0345 za 2604 refleksija sa I  $\geq$  2 $\sigma$ (I).

Slika 2. Projekcija lanaca na bc-ravan.

- [1] Y.B. Go, X. Wang, E.V. Anokhina, A.J. Jacobson, *Inorg. Chem.* **43** (2004) 5360-5367;  
J. Tao, M.L. Tong, X.M. Chen, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 2000, 3669-4674.  
[2] J. Rogan, D. Poleti, Lj. Karanović, G. Bogdanović, A. Spasojević-de Biré, D.M. Petrović, *Polyhedron*, **19** (2000) 1415-1421.