

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО**

**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

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

**Abstracts**

Чачак – Čačak  
2023.

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ  
КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**Издавач:**

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

**За издавача:**

Тамара Тодоровић

**Уредник:**

Бождар Чобелјић

**Технички уредник:**

Предраг Ристић

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

© Српско кристалографско друштво

ISBN 978-86-912959-6-7  
ISSN 0354-5741

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

Тираж: 50

Београд  
2023

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

**Abstracts**

**Publisher:**

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

**For the publisher:**

Tamara Todorović

**Editor:**

Božidar Čobeljić

**Technical editor:**

Predrag Ristić

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

© Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-6-7  
ISSN 0354-5741

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

Copies: 50

Belgrade  
2023



СРПСКО  
КРИСТАЛОГРАФСКО  
ДРУШТВО



SERBIAN  
CRYSTALLOGRAPHIC  
SOCIETY

## XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

## 28<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

### Научни одбор:

др Љиљана Карановић, РГФ, Београд  
др Катарина Анђелковић, ХФ, Београд  
др Оливера Клисурић, ПМФ, Нови Сад  
др Јелена Роган, ТМФ, Београд  
др Горан Богдановић, „ВИНЧА”, Београд  
др Мирјана Милић, „ВИНЧА”, Београд  
др Александар Кременовић, РГФ, Београд  
др Андријана Жекић, ФФ, Београд  
др Марко Родић, ПМФ, Нови Сад  
др Душан Вељковић, ХФ, Београд  
др Верица Јевтић, ПМФ, Крагујевац  
др Александра Дапчевић, ТМФ, Београд  
др Сабина Ковач, РГФ, Београд  
др Божидар Чобелић, ХФ, Београд  
др Маја Ђукић, ПМФ, Крагујевац  
др Душанка Радановић, ИХТМ, Београд  
др Предраг Дабић, РГФ, Београд  
др Тамара Тодоровић, ХФ, Београд  
др Наташа Јовић Орсини, „ВИНЧА”,  
Београд

### Организациони одбор:

Тамара Тодоровић, ХФ, Београд  
Божидар Чобелић, ХФ, Београд  
Катарина Анђелковић, ХФ, Београд  
Предраг Ристић, ХФ, Београд  
Мима Јевтовић, ИЦХФ, Београд  
Невена Стевановић, ХФ, Београд  
Драгана Митић, ИЦХФ, Београд  
Јована Арашков, ХФ, Београд  
Сања Коканов, ХФ, Београд  
Андреј Миливојац, ИЦХФ, Београд

### Scientific Committee:

Dr Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade  
Dr Katarina Anđelković, HF, Belgrade  
Dr Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad  
Dr Jelena Rogan, TMF, Belgrade  
Dr Goran Bogdanović, „VINČA”, Belgrade  
Dr Mirjana Milić, „VINČA”, Belgrade  
Dr Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade  
Dr Andrijana Žekić, FF, Belgrade  
Dr Marko Rodić, PMF, Novi Sad  
Dr Dušan Veljković, HF, Belgrade  
Dr Verica Jevtić, PMF, Kragujevac  
Dr Aleksandra Dapčević, TMF, Belgrade  
Dr Sabina Kovač, RGF, Belgrade  
Dr Božidar Čobeljić, HF, Belgrade  
Dr Maja Đukić, PMF, Kragujevac  
Dr Dušanka Radanović, IHTM, Belgrade  
Dr Predrag Dabić, RGF, Belgrade  
Dr Tamara Todorović, HF, Belgrade  
Dr Nataša Jović Orsini, „VINČA”, Belgrade

### Organizing Committee:

Tamara Todorović, HF, Belgrade  
Božidar Čobeljić, HF, Belgrade  
Katarina Anđelković, HF, Belgrade  
Predrag Ristić, HF, Belgrade  
Mima Jevtović, ICHF, Belgrade  
Nevena Stevanović, HF, Belgrade  
Dragana Mitić, ICHF, Belgrade  
Jovana Araškov, HF, Belgrade  
Sanja Kokanov, HF, Belgrade  
Andrej Milivojac, ICHF, Belgrade

## KRISTALOGRAFSKO, SPEKTROSKOPSKO I RAČUNARSKO ISPITIVANJE KOMPLEKSA CINKA SA 2,2'-DIPIRIDILAMINOM I ANJONOM FURANDIKARBOKSILNE KISELINE

**L. Radovanović<sup>a</sup>, D. P. Malenov<sup>b</sup>, J. Rogan<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija; <sup>b</sup> Univerzitet u Beogradu, Hemijski fakultet, Beograd, Srbija; <sup>c</sup> Univerzitet u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet, Beograd, Srbija

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

Koordinacioni polimeri intenzivno se proučavaju zbog svojih različitih strukturnih oblika i brojnih mogućnosti primene [1]. Anjoni 2,5-furandikarboksilne kiseline (H<sub>2</sub>fdc), biološkog porekla, odlični su mostovni ligandi za sintezu koordinacionih polimera zbog strukturne sličnosti sa anjonima tereftalne kiseline [1].

Polimerni kompleks [Zn(fdc)(dipya)]·H<sub>2</sub>O, **1**, sa 2,2'-dipiridilaminom (dipya) i dianjonom H<sub>2</sub>fdc sintetisan je u obliku monokristala i okarakterisan rendgenskom strukturnom analizom i FTIR-spektroskopijom, kao i proračunom nekovalentnih interakcija. Atomi Zn nalaze se u deformisanom tetraedarskom okruženju koje čine helatno koordinirani dipya-ligand i dva bis-monodentatno koordinirana fdc<sup>2-</sup>-liganda. Zbog mostovnog načina koordinacije fdc, strukturni fragmenti formiraju polimerne cik-cak lance, dok je supramolekulsko 3D umrežavanje postignuto preko mnogobrojnih nekovalentnih interakcija. Izračunate Hiršfildove površine i odgovarajući 2D grafički prikazi otisaka nekovalentnih interakcija za monomernu jedinku kompleksa **1** pokazuju da atom metala ne učestvuje u uspostavljanju interakcija. Dve tetraedarske jedinice povezane su prvenstveno kombinacijom C–H···O i π–π interakcija, čija energija, izračunata B3LYP-D3/def2-SVP metodom, iznosi –20,75 kcal/mol, dok je dodatno povezivanje omogućeno preko C–H···π i C–H···O interakcija (–14,04 kcal/mol). Dalja stabilizacija postignuta je vodoničnim vezama između nekoordiniranog molekula vode sa dipya- (–10,88 kcal/mol) i fdc-ligandima (–6,87 kcal/mol).

*Kristalografski podaci:* C<sub>16</sub>H<sub>13</sub>N<sub>3</sub>O<sub>6</sub>Zn, M<sub>r</sub> = 408,7, rombičan kristalni sistem, prostorna grupa C222<sub>1</sub>, a = 5,7164(11), b = 18,986(4), c = 15,248(3) Å, V = 1654,9(6) Å<sup>3</sup>, Z = 4, F(000) = 832, ρ<sub>x</sub> = 1,64 g cm<sup>-3</sup>, μ(MoKα) = 1,524 mm<sup>-1</sup>. Utačnjavanje sa F<sup>2</sup> (123 parametara) dalo je R<sub>1</sub> = 0,0217, wR<sub>2</sub> = 0,0511, S = 1,083 za sve podatke i R<sub>1</sub> = 0,0203 za 1455 uočenih refleksija sa I ≥ 2σ(I).

[1] E. R. Engel, J. L. Scott, *Green Chem.*, **22** (2020) 3693–3715.

## CRYSTALLOGRAPHIC, SPECTROSCOPIC AND COMPUTATIONAL STUDY OF ZINC COMPLEX WITH 2,2'-DIPYRIDYLAMINE AND ANION OF FURANDICARBOXYLIC ACID

**L. Radovanović<sup>a</sup>, D. P. Malenov<sup>b</sup>, J. Rogan<sup>c</sup>**

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

Coordination polymers (CPs) have received significant attention due to their structural diversities and numerous possible applications [1]. The anions of bio-based 2,5-furandicarboxylic acid (H<sub>2</sub>fdc) are versatile bridging ligands for the synthesis of CPs because of the structural similarity to the anions of terephthalic acid [1].

The single crystals of CP with 2,2'-dipyridylamine (dipya) and dianion of H<sub>2</sub>fdc, [Zn(fdc)(dipya)]·H<sub>2</sub>O, **1**, have been synthesized and characterized by single-crystal X-ray diffraction and FTIR spectroscopy, together with computational analysis of noncovalent interactions. Zn centers are situated in a deformed tetrahedral environment consisting of one chelate dipya and two bis-monodentate fdc<sup>2-</sup> ligands. Due to the bridging role of fdc, the structural fragments form polymeric zigzag chains, while the 3D supramolecular network is established through numerous noncovalent interactions. The Hirshfeld surface and corresponding 2D fingerprint plots of noncovalent interactions for monomer unit of **1** show non-involvement of metal center in any of the interactions. Two tetrahedral units interact primarily via the combination of C–H···O and stacking interactions, with B3LYP-D3/def2-SVP interaction energy of –20.75 kcal/mol, while another contact is established through C–H···π and C–H···O interactions (–14.04 kcal/mol). Additional stabilization is provided by hydrogen bonds of uncoordinated water molecule with dipya (–10.88 kcal/mol) and fdc ligands (–6.87 kcal/mol).

*Crystal data:* C<sub>16</sub>H<sub>13</sub>N<sub>3</sub>O<sub>6</sub>Zn, *M<sub>r</sub>* = 408.7, orthorhombic system, space group C222<sub>1</sub>, *a* = 5.7164(11), *b* = 18.986(4), *c* = 15.248(3) Å, *V* = 1654.9(6) Å<sup>3</sup>, *Z* = 4, *F*(000) = 832, *ρ<sub>x</sub>* = 1.64 g cm<sup>-3</sup>, *μ*(MoKα) = 1.524 mm<sup>-1</sup>. The refinement on *F*<sup>2</sup> (123 parameters) yielded *R*<sub>1</sub> = 0.0217, *wR*<sub>2</sub> = 0.0511, *S* = 1.083 for all data, and *R*<sub>1</sub> = 0.0203 for 1455 observed reflections with *I* ≥ 2σ(*I*).

[1] E. R. Engel, J. L. Scott, *Green Chem.*, **22** (2020) 3693–3715.