

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**28th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Чачак – Шаќак
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

**28th 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

28th 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

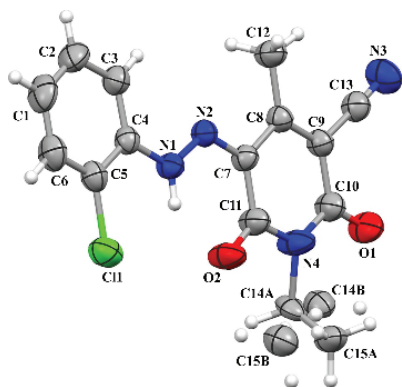
ТАУТОМЕРИЈА АЗО ПИРИДОНСКИХ БОЈА: КРИСТАЛНА СТРУКТУРА И СОЛВАТОХРОМНА СВОЈСТВА

Ј. Лађаревић^а, Ј. Радовановић^б, А. Машуловић^б, Н. Тришовић^а, А. Лазић^б, Ј. Роган^а, Д. Мијин^а

^а Универзитет у Београду, Технолошко-металуришки факултет, Карнегијева 4, Београд, Србија; ^б Иновациони центар Технолошко-металуришког факултета,, Карнегијева 4, Београд, Србија
e-mail: jmirkovic@tmf.bg.ac.rs

Азо боје се последњих деценија примењују у различитим областима због изузетних својстава. Њихова примена је у великој мери повезана са феноменом азо-хидразон таутомерије. Наиме, одређивање структурног облика азо боја је значајно како са теоријског становишта, тако и из техничке перспективе јер азо и хидразон таутомери поседују различита физичка и хемијска својства.

У овом раду, синтетисана је азо боја (5-(2-хлорфенилазо)-3-цијано-1-етил-6-хидрокси-4-метил-2-пиридон) и окарактерисана елементалном анализом, NMR и ATR-FTIR спектроскопијом и рендгенском структурном анализом (слика). Солватохромна својства боје испитана су UV-Vis спектроскопијом у различитим растварачима како би се утврдио доминантан структурни облик боје.



Слика. Асиметрична јединица азо боје

Кристална структура је показала да боја кристалише у облику хидразон таутомера. Стабилизација кристалног паковања остварена је посредством различитих нековалентних интеракција као што су C–H \cdots O/N, π - π , слободан електронски пар- π и Cl \cdots O.

Кристаллографски подаци:
C₁₅H₁₃ClN₄O₂, $M_r = 316,74$, триклиничан систем, просторна група $P\bar{1}$, $a = 7,9490(16)$, $b = 8,9645(18)$, $c = 11,697(2)$ Å, $\alpha = 72,92(3)$, $\beta = 83,59(3)$, $\gamma = 66,77(3)^\circ$, $V = 732,1(3)$ Å³, $Z = 2$, $F(000) = 328$, $\rho_x = 1,437$ g cm⁻³, $\mu(\text{MoK}\alpha) = 0,274$ mm⁻¹, $R_1 = 0,0447$ и $S = 1,018$ за утачњених 219 параметара и 1941 примењених рефлексија са $I \geq 2\sigma(I)$.

TAUTOMERISM OF AZO PYRIDONE DYES: CRYSTAL STRUCTURE AND SOLVATOCHROMIC ANALYSIS

J. Ladarević^a, **L. Radovanović**^b, **A. Mašulović**^a, **N. Trišović**^a, **A. Lazić**^b,
J. Rogan^a, **D. Mijin**^a

^a University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia; ^bInnovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

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

Tremendous progress in the application of azo dyes in various fields has been achieved over the past few decades due to their intriguing properties. Their application is closely related to the phenomenon of azo-hydrazone tautomerism. Determination of the structural isomer of the azo dyes is not only important from the theoretical standpoint but also from the technical perspective since azo and hydrazone tautomers have distinctive physical and chemical properties.

In this work, azo pyridone dye (5-(2-chlorophenylazo)-3-cyano-1-ethyl-6-hydroxy-4-methyl-2-pyridone) has been synthesized and characterized by elemental analysis, NMR and ATR-FTIR spectroscopy and single-crystal X-ray analysis (Figure). Solvatochromic properties of the dye have been investigated using UV-Vis spectroscopy in solvents of different polarity in order to determine the dominant form in solvents.

The crystal structure of the dye shows that the dye crystallizes in the hydrazone form. The stabilization of the crystal packing is achieved by weak non-covalent interactions: C–H···O/N, π - π , lone pair- π and Cl···O.

Crystal data: C₁₅H₁₃ClN₄O₂, $M_r = 316.74$, triclinic, space group $P\bar{1}$, $a = 7.9490(16)$, $b = 8.9645(18)$, $c = 11.697(2)$ Å, $\alpha = 72.92(3)$, $\beta = 83.59(3)$, $\gamma = 66.77(3)^\circ$, $V = 732.1(3)$ Å³, $Z = 2$, $F(000) = 328$, $\rho_x = 1.437$ g cm⁻³, $\mu(\text{MoK}\alpha) = 0.274$ mm⁻¹, $R_1 = 0.0447$ and $S = 1.018$ for 219 refined parameters and 1941 observed reflections with $I \geq 2\sigma(I)$.

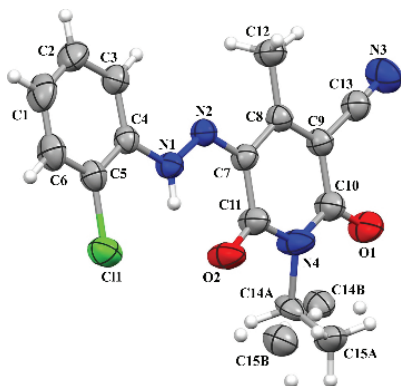


Figure. Asymmetric unit of the azo dye.