

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО**

**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**23<sup>rd</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**Abstracts**

Андревље – Andrevlje  
2016.

**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ  
КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

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

За издавача:  
Оливера Клисурић

Уредник:  
Оливера Клисурић

Технички уредник:  
Мирјана Радановић

уз помоћ:  
Марко Родић  
Љиљана Војиновић Јешић

Издавање ове публикације омогућено је  
финансијском помоћи Природно-мате-  
матичког факултета Универзитета у Но-  
вом Саду

© Српско кристалографско друштво

ISBN 978-86-912959-3-6

Штампа:  
Футура д.о.о.  
Мажуранићева 46  
21131 Петроварадин

Тираж: 100

Нови Сад  
2016

**23<sup>rd</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:  
Olivera Klisurić

Editor:  
Olivera Klisurić

Technical editor:  
Mirjana Radanović

with the help of:  
Marko Rodić  
Ljiljana Vojinović Ješić

This publication is financially supported by  
the Faculty of Sciences University of Novi Sad

© Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-3-6

Printing:  
Futura d.o.o.  
Mažuranićeva 46  
21131 Petrovaradin

Copies: 100

Novi Sad  
2016

CIP - Каталогизација у публикацији  
Библиотека Матице српске, Нови Сад

548/549(048.3)

**СРПСКО кристалографско друштво. Конференција (23 ; 2016 ; Андrevље)**

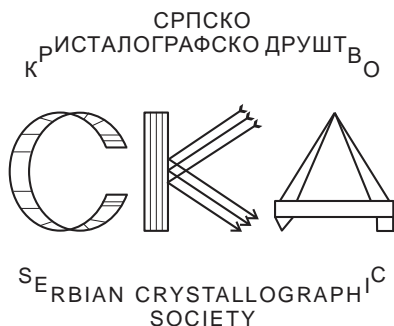
Изводи радова / XXIII конференција Српског кристалографског друштва, Андrevље, [9-11. 6.]  
2016. ; [уредник Оливера Клисурић] = Abstracts / 23rd Conference of the Serbian Crystallographic Soci-  
ety, Andrevlje, [9-11. 6.] 2016. ; [editor Olivera Klisurić]. - Београд : Српско кристалографско друштво,  
2016 (Петроварадин : Футура). - 106 стр. : илустр. ; 25 cm

Упоредо енгл. и срп. текст. - Тираж 100.

ISBN 978-86-912959-3-6

1. Ур. ств. насл.

а) Кристалографија - Апстракти б) Минералологија - Апстракти



**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ  
ДРУШТВА**

**23<sup>rd</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC  
SOCIETY**

**Научни одбор:**

Др Дејан Полети, ТМФ, Београд  
Др Јелена Роган, ТМФ, Београд  
Др Љиљана Карановић, РГФ, Београд  
Др Срећко Трифуновић, ПМФ, Крагујевац  
Др Александар Кременовић, РГФ, Београд  
Др Предраг Вулић, РГФ, Београд  
Др Агнеш Капор, ПМФ, Нови Сад  
Др Срђан Ракић, ПМФ, Нови Сад  
Др Olivera Klisuriћ, ПМФ, Нови Сад  
Др Snežana Zarić, ХФ, Београд  
Др Bratislav Antić, „ВИНЧА”, Београд  
Др Goran Bogdanović, „ВИНЧА”, Београд  
Др Slađana Novaković, „ВИНЧА”, Београд

**Scientific Committee:**

Dr. Dejan Poleti, TMF, Belgrade  
Dr. Jelena Rogan, TMF, Belgrade  
Dr. Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade  
Dr. Srećko Trifunović, PMF, Kragujevac  
Dr. Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade  
Dr. Predrag Vulić, RGF, Belgrade  
Dr. Agneš Kapor, PMF, Novi Sad  
Dr. Srđan Rakić, PMF, Novi Sad  
Dr. Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad  
Dr. Snežana Zarić, HF, Belgrade  
Dr. Bratislav Antić, “VINČA”, Belgrade  
Dr. Goran Bogdanović, “VINČA”, Belgrade  
Dr. Slađana Novaković, “VINČA”, Belgrade

**Организациони одбор:**

Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad  
Marko Rodić, PMF, Novi Sad  
Ljiljana Vojinović Ješić, PMF, Novi Sad  
Mirjana Radanović, PMF, Novi Sad

**Organizing Committee:**

Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad  
Marko Rodić, PMF, Novi Sad  
Ljiljana Vojinović Ješić, PMF, Novi Sad  
Mirjana Radanović, PMF, Novi Sad

## KRISTALNA STRUKTURA KOMPLEKSA KOBALTA(II) SA 2,2'-BIPIRIDINOM I ANJONOM MELITNE KISELINE

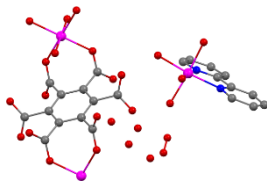
**L. Radovanović<sup>1</sup>, J. Rogan<sup>2</sup>, D. Poletić<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11000 Beograd, Srbija; <sup>2</sup>Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11000 Beograd, Srbija  
e-mail: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

Zbog postojanja velikog broja atoma kiseonika, benzenheksakarboksilna ili melitna kiselina (H<sub>6</sub>mell) je fascinantan polikarboksilatni ligand za sintezu visoko umreženih koordinacionih jedinjenja [1]. Reakcijom izmene liganada između Co(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, Na<sub>6</sub>mell i 2,2'-bipiridina (bipy) dobijeno je koordinaciono jedinjenje formule {[Co(bipy)(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>][Co<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>(mell)]·5H<sub>2</sub>O}<sub>n</sub>. Analiza kristalne strukture pokazala je da se strukturni fragment kompleksa (slika 1) sastoji od dva nezavisna dela. Kompleksni katjon sadrži jon Co(II) za koji je helatno koordiniran ligand bipy i četiri molekula vode. Polimerni kompleksni anjon takođe sadrži jone Co(II) koordinirane sa po dva molekula vode i premošćene anjonima mell<sup>6-</sup>. Osim toga, u kristalnoj rešetki postoji još pet nekoordiniranih molekula vode.

Jon mell<sup>6-</sup> je centrosimetričan, bis-helatni i ima četiri monodentatno koordinirane COO-grupe, dok dve COO-grupe ostaju slobodne. Kompleksni anjoni povezani su u cik-cak lanac koji se pruža duž pravca [100] (slika 2). U oba dela, koordinaciona geometrija oko Co(II)-jona može se opisati kao oktaedarska i ona obuhvata četiri O-atoma iz četiri COO-grupe i dva O-atoma iz dva molekula vode u slučaju anjonskog dela, a dva N-atoma iz bipy i četiri O-atoma iz četiri molekula vode koji pripadaju katjonskom delu kompleksa. Piridinski prstenovi liganda bipy skoro su koplanarni, sa diedarskim uglom od samo 4,4(1) °.

Mreža vodoničnih veza obuhvata sve molekule vode i sve COO-grupe, što dovodi do formiranja složene trodimenzionalne strukture. Između naizmenično postavljenih liganada bipy postoje jake „face to face“ π-π interakcije sa Cg...Cg rastojanjima 3,529(2) i 3,589(2) Å, koje dodatno stabilizuju kristalnu strukturu kompleksa.



Slika 1. Strukturni fragment kompleksa {[Co(bipy)(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>][Co<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>(mell)]·5H<sub>2</sub>O}<sub>n</sub>

*Kristallografski podaci:* C<sub>32</sub>H<sub>56</sub>Co<sub>3</sub>N<sub>4</sub>O<sub>32</sub>, M<sub>r</sub> = 1185,60, triklinični sistem, prostorna grupa P $\bar{1}$ , a = 8,522(2), b = 11,840(2), c = 12,201(2) Å, α = 83,01(3), β = 74,20(3), γ = 77,47 (3) °, V = 1153,8(4) Å<sup>3</sup>, Z = 2, F(000) = 613, ρ<sub>x</sub> = 1,706 g cm<sup>-3</sup>, μ(MoKα) = 1,174 mm<sup>-1</sup>. Utačnjavanje sa F<sup>2</sup> (386 parametara) dalo je R<sub>1</sub> = 0,0514, wR<sub>2</sub> = 0,1169, S = 1,053 za sve podatke, i R<sub>1</sub> = 0,0434 za 3788 refleksija sa I ≥ 2σ(I).

[1] M.Y. Li, S.C. Sevov, *CrystEngComm*, **15** (2013) 1225–1234.

## CRYSTAL STRUCTURE OF COBALT(II) COMPLEX WITH 2,2'-BIPYRIDINE AND ANION OF MELLITIC ACID

**L. Radovanović<sup>1</sup>, J. Rogan<sup>2</sup>, D. Poleti<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Innovation Center of Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia; <sup>2</sup>Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia  
e-mail: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

Due to the large number of oxygen atoms, benzenhexacarboxylic or mellitic acid ( $H_6\text{mell}$ ) is a fascinating polycarboxylate ligand for the synthesis of multidimensional coordination frameworks [1]. Starting from  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$ ,  $\text{Na}_6\text{mell}$  and 2,2'-bipyridine (bipy), we have prepared a coordination compound with the formula  $\{[\text{Co}(\text{bipy})(\text{H}_2\text{O})_4][\text{Co}_2(\text{mell})(\text{H}_2\text{O})_4]\cdot 5\text{H}_2\text{O}\}_n$  by ligand exchange reaction. The crystal structure analysis revealed that structural fragment (Fig. 1) consists of two independent parts. Complex cation includes Co(II) ion with chelately coordinated bipy ligand and four water molecules. The polymeric complex anion also comprises of Co(II) ions, but coordinated with two water molecules and bridged by  $\text{mell}^{6-}$  anions. In addition, there are five lattice water molecules.

$\text{Mell}^{6-}$  is a centrosymmetric ligand, coordinated as bis-chelate with four monodentately coordinated COO groups, while two COO groups are uncoordinated. Complex anions are connected into the zigzag chain running along [100] direction (Fig. 2). In both parts, the coordination geometry around Co(II) atoms can be described as octahedral comprised of four O atoms from two COO groups and two O atoms from two water molecules in the anionic part, and two N atoms from bipy and four O atoms from four water molecules belonging to the cationic part of the complex. The pyridyl rings of bipy are almost coplanar with dihedral angle of only  $4.4(1)^\circ$ .

The network of hydrogen bonds involves all water molecules and all COO groups, resulting in a very complex three-dimensional framework. The crystal structure is further stabilized by strong face to face  $\pi$ - $\pi$  interactions between alternating bipy ligands at  $\text{Cg}\cdots\text{Cg}$  distances of  $3.529(2)$  and  $3.589(2)$  Å.

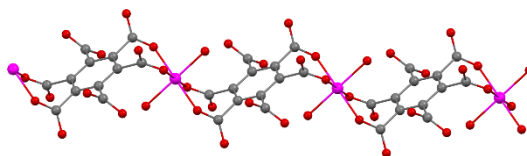


Fig. 2. The zigzag chain of the complex anions

*Crystal data:*  $\text{C}_{32}\text{H}_{56}\text{Co}_3\text{N}_4\text{O}_{32}$ ,  $M_r = 1185.60$ , triclinic,  $P\bar{1}$ ,  $a = 8.522(2)$ ,  $b = 11.840(2)$ ,  $c = 12.201(2)$  Å,  $\alpha = 83.01(3)$ ,  $\beta = 74.20(3)$ ,  $\gamma = 77.47(3)^\circ$ ,  $V = 1153.8(4)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $F(000) = 613$ ,  $\rho_x = 1.706$  g cm<sup>-3</sup>,  $\mu(\text{MoK}\alpha) = 1.174$  mm<sup>-1</sup>. The refinement on  $F^2$  (386 parameters) yielded  $R_1 = 0.0514$ ,  $wR_2 = 0.1169$ ,  $S = 1.053$  for all data, and  $R_1 = 0.0434$  for 3788 observed reflections with  $I \geq 2\sigma(I)$ .

[1] M.Y. Li, S.C. Sevov, *CrystEngComm*, **15** (2013) 1225–1234.