

**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 – 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

**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

## СУПРАМОЛЕКУЛСКИ ПРИСТУП БОЈЕЊУ: КРИСТАЛНО ПАКОВАЊЕ АЗО ПИРИДОНСКЕ БОЈЕ

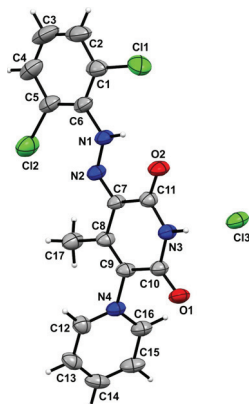
**А. Машуловић**<sup>а</sup>, **Л. Радовановић**<sup>а</sup>, **Ј. Лађаревић**<sup>б</sup>, **А. Лазић**<sup>а</sup>,  
**Н. Тришовић**<sup>б</sup>, **Ј. Роган**<sup>б</sup>, **Д. Мијин**<sup>б</sup>

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

Реакција азо купловања омогућава лаку синтезу низа молекула са различитим својствима, што чини азо боје најраспрострањенијим колорантима. Поред примене азо боја у текстилној индустрији, примењују се и код производа напредних технологија. Такође, позната су и по својој изванредној биолошкој активности. Присуство језгра пиридина значајно побољшава обојење и постојаност боја. Супрамолекулским приступом објашњавају се интра- и интер-молекулске интеракције, што омогућава боље разумевање интеракција између боја и текстилног влакна [1].

У овом раду добијен је 5'-(2-(2,6-дихлорфенил)хидразон)-4'-метил-2',6'-диоокси-1',2',5',6'-тетрахидро-[1,3'-бипиридин]-1-иум-хлорид (слика). Структура једињења потврђена је NMR, ATR-FTIR, UV-Vis спектроскопијама и рендгенском структурном анализом. Супрамолекулско умрежавање постигнуто је водоничним везама,  $\pi$ -интеракцијама, интеракцијама атома хлора везаних за фенилно језгро као и интеракцијама  $\text{Cl}^-$ -јона који се налази у кристалној решетки. Овим интеракцијама објашњена је и способност везивања боје за текстилно влакно.

Кристалнографски подаци:  $\text{C}_{34}\text{H}_{26}\text{Cl}_6\text{N}_8\text{O}_4$ ,  
 $M_r = 823,33$ ,  $P-1$ ,  $a = 7,3784(15)$ ,  $b = 10,394(2)$ ,  
 $c = 13,254(3)$  Å,  $\alpha = 103,29(3)$ ,  $\beta = 105,71(3)$ ,  
 $\gamma = 106,11(3)^\circ$ ,  $V = 887,5(4)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 1$ ,  
 $F(000) = 420$ ,  $\rho_x = 1,541$  g cm<sup>-3</sup>,  
 $\mu(\text{MoK}\alpha) = 0,537$  mm<sup>-1</sup>. Утачњавање са  $F^2$  (236  
параметара) дало је  $R_1 = 0,0561$  и  $S = 1,063$  за  
3247 примећених рефлексија са  $I \geq 2\sigma(I)$ .



Слика. ORTEP приказ молекула  
азо боје.

[1] А. Mašulović, Ј. Lađarević, А. Ivanovska, S. Stupar, M. Vukčević, M. Kostić, D. Mijin, *Dyes Pigment.*, **195** (2021) 109741.

## SUPRAMOLECULAR APPROACH OF DYEING: CRYSTAL PACKING OF PYRIDONE AZO DYE

**A. Mašulović**<sup>a</sup>, **L. Radovanović**<sup>a</sup>, **J. Lađarević**<sup>b</sup>, **A. Lazić**<sup>a</sup>, **N. Trišović**<sup>b</sup>,  
**J. Rogan**<sup>b</sup>, **D. Mijin**<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia;* <sup>b</sup> *Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia;*  
e-mail: amasulovic@tmf.bg.ac.rs

The reaction of azo coupling easily provides access to a wide range of different molecules with numerous material properties, therefore making azo dyes most widely used colorants. Their use is not limited only on textile dyeing as it expands on usage in advanced technology products. On the other hand, these compounds are known for their remarkable biological activities. Inclusion of a pyridine ring into the molecular architecture leads to a better color properties. Supramolecular organization of azo dyes provides details on the molecular conformation, including intra- and inter-molecular interactions in the solid state. This information assists towards understanding of molecular properties as well as dye–fibre interactions [1].

In this work azo coupling reaction was employed to obtain 5'-(2-(2,6-dichlorophenyl)hydrazono)-4'-methyl-2',6'-dioxo-1',2',5',6'-tetrahydro-[1,3'-bipyridin]-1-ium chloride (Figure). The molecular structure was confirmed by <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C NMR, ATR-FTIR, UV-Vis spectroscopies and by single-crystal X-Ray diffraction. Various hydrogen bonds,  $\pi$ -stacking interactions and interactions involving chlorine substituents, as well as the chloride ion are responsible for supramolecular organization. Furthermore these interactions were used to explain dye-fiber affinities.

*Crystal data:* C<sub>34</sub>H<sub>26</sub>Cl<sub>6</sub>N<sub>8</sub>O<sub>4</sub>, *M*<sub>r</sub> = 823.33, *P*-1, *a* = 7.3784(15), *b* = 10.394(2), *c* = 13.254(3) Å,  $\alpha$  = 103.29(3),  $\beta$  = 105.71(3),  $\gamma$  = 106.11(3)°, *V* = 887.5(4) Å<sup>3</sup>, *Z* = 1, *F*(000) = 420,  $\rho_x$  = 1.541 g cm<sup>-3</sup>,  $\mu$ (MoK $\alpha$ ) = 0.537 mm<sup>-1</sup>. The refinement on *F*<sup>2</sup> (236 parameters) yielded *R*<sub>1</sub> = 0.0561 and *S* = 1.063 for 3247 observed reflections with *I* ≥ 2 $\sigma$ (*I*).

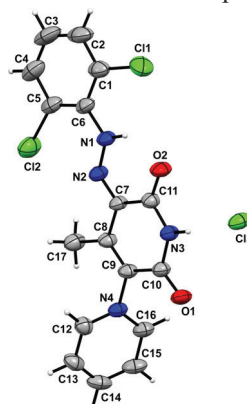


Figure. ORTEP diagram of a molecule of the dye.

[1] A. Mašulović, J. Lađarević, A. Ivanovska, S. Stupar, M. Vukčević, M. Kostić, D. Mijin, *Dyes Pigm.*, **195** (2021) 109741.