

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

27th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Abstracts

Крагујевац – Kragujevac
2021.

XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА
Изводи радова

27th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Abstracts

Издавач - Publisher:

– Српско кристалографско друштво
Ђушина 7, 11000 Београд, Србија, тел. 011-3336-701
– Serbian Crystallographic Society
Đušina 7, 11 000 Belgrade, Serbia, phone: +381 11 3336 701

За издавача – For the publisher:

Марија Станић – Marija Stanić

Уредник – Editor:

Верица Јевтић – Verica Jevtić

Технички уредник – Technical editor:

Маја Ђукић – Maja Đukić

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

© Српско кристалографско друштво – Serbian Crystallographic Society
ISBN 978-86-6009-085-2
ISSN 0354-5741

Штампа – Printing:

Природно-математички факултет, Радоја Домановића 12, Крагујевац, Србија
Faculty of Science, Radoje Domanović 12, Kragujevac, Serbia

Тираж – Copies: 50
Крагујевац – Kragujevac
2021.

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**27th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:

др Љиљана Карановић, РГФ Београд / dr Ljiljana Karanović, FMG Belgrade
др Тамара Тодоровић, ХФ Београд / dr Tamara Todorović, FC Belgrade
др Марко Родић, ПМФ Нови Сад / dr Marko Rodić, FS Novi Sad
др Душан Велковић, ХФ Београд / dr Dušan Veljković, FC Belgrade
др Оливера Клисурић, ПМФ Нови Сад / dr Olivera Klisurić, FS Novi Sad
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, FTM Belgrade
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА” / dr Goran Bogdanović, INS "Vinča"
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, FMG Belgrade
др Братислав Антић, ИНН „ВИНЧА” / dr Bratislav Antić, INN "Vinča"
др Снежана Зарић, ХФ Београд / dr Snežana Zarić, FC Belgrade
др Катарина Анђелковић, ХФ Београд / dr Katarina Anđelković, FC Belgrade
др Срђан Ракић, ПМФ Нови Сад / dr Srđan Rakić, FS Novi Sad
др Наташа Јовић Орсини, ИНН „ВИНЧА” / dr Nataša Jović Orsini, INS "Vinča"
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, FTM Belgrade

ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZATION COMMITTEE:

др Верица Јевтић, ПМФ Крагујевац / dr Verica Jevtić, FS Kragujevac
др Гордана Радић, ФМН Крагујевац / dr Gordana Radić, FMS Kragujevac
др Аница Глођовић, ПМФ Крагујевац / dr Anica Glidović, FS Kragujevac
др Андрија Ћирић, ПМФ Крагујевац / dr Andrija Ćirić, FS Kragujevac
др Марина Ћендић Серафиновић, ПМФ Крагујевац / dr Marina Ćendić Serafinović, FS Kragujevac
др Марија Ристић, ПМФ Крагујевац / dr Marija Ristić, FS Kragujevac
др Емина Мркалић, ИИТ Крагујевац / dr Emina Mrkalić, ИТ Кragujevac
др Данијела Стојковић, ИИТ Крагујевац / dr Danijela Stojković, ИТ Кragujevac
др Едина Авдовић, ИИТ Крагујевац / dr Edina Avdović, ИТ Кragujevac
др Маја Ђукић, ПМФ Крагујевац / dr Маја Đukić, FS Kragujevac
Сандра Јовичић Милић, ПМФ Крагујевац / Sandra Jovičić Milić, FS Kragujevac
Ђорђе Петровић, ПМФ Крагујевац / Đorđe Petrović, FS Kragujevac
Маријана Касаловић, ПМФ Крагујевац / Marijana Kasalović, FS Kragujevac
Марко Радовановић, ПМФ Крагујевац / Marko Radovanović, FS Kragujevac
Игњат Филиповић, ПМФ Крагујевац / Ignjat Filipović, FS Kragujevac

ОРГАНИЗАТОРИ



СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY



ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
FACULTY OF SCIENCE
UNIVERSITY OF KRAGUJEVAC

ПОКРОВИТЕЉ



МИНИСТАРСТВО ПРОСВЕТЕ, НАУКЕ И
ТЕХНОЛОШКОГ РАЗВОЈА РЕПУБЛИКЕ СРБИЈЕ
MINISTRY OF EDUCATION, SCIENCE AND
TECHNOLOGICAL DEVELOPMENT OF THE
REPUBLIC OF SERBIA

САДРЖАЈ – CONTENT

PLENARNA PREDAVANJA - PLENARY LECTURES

G. N. Kaluderović

IMMOBILIZATION OF THE ANTITUMOR ACTIVE COMPOUNDS INTO SBA-15..... 2

Н. Филиповић

(1,3-THIAZOLYL/SELENAZOYL-2-YL)HYDRAZONES AND THEIR COMPLEXES: OD STRUKTURE DO POTENCIJALNE PRIMENE..... 4

N. Filipović

(1,3-THIAZOLYL/SELENAZOYL-2-YL)HYDRAZONES AND THEIR COMPLEXES: FROM STRUCTURE TO POTENTIAL APPLICATION..... 5

C. S. B. Gomes

IMINOPYRROLYL-NICKEL AND BORON COMPLEXES: STRUCTURE-PROPERTY RELATIONSHIP ANALYSIS AND APPLICATIONS IN LUMINESCENCE AND CATALYSIS..... 6

USMENA SAOPŠTENJA - ORAL PRESENTATIONS

A. Mašulović, J. Ladarević, L. Radovanović, K. Gak Simić, N. Trišović, J. Rogan, D. Mijin
SAMOORGANIZACIJA PAKOVANJA DIPOL-JON PIRIDONA PREKO MOLEKULA VODE..... 10

A. Mašulović, J. Ladarević, L. Radovanović, K. Gak Simić, N. Trišović, J. Rogan, D. Mijin
WATER ASSISTED ASSEMBLY OF PYRIDONE ZWITTERIONS..... 11

Александра Ракић, Марија Петковић Benazzouz, Немања Тришовић, Горан Јањић
ФЛУОРОВАЊЕ АЛИФАТИЧНИХ ЈЕДИЊЕЊА. ПОКРЕТАЧКА СИЛА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА..... 12

Aleksandra Rakić, Marija Petković Benazzouz, Nemanja Trišović, Goran Janjić
FLUORINATION OF ALIPHATIC COMPOUNDS. DRIVING FORCE IN CRYSTAL STRUCTURES..... 13

А. Б. Ђуновић, Д. С. Кретић, И. С. Вељковић, Д. Ж. Вељковић
УЛОГА НЕКОВАЛЕНТНИХ ИНТЕРАКЦИЈА У КОНТРОЛИ ОСЕТЉИВОСТИ ВИСОКОЕНЕРГЕТСКИХ МОЛЕКУЛА КА ДЕТОНАЦИЈИ..... 14

A. B. Đunović, D. S. Kretić, I. S. Veljković, D. Ž. Veljković
ROLE OF NONCOVALENT INTERACTIONS IN THE CONTROL OF THE SENSITIVITY OF HIGH ENERGETIC MOLECULES TOWARDS DETONATION..... 15

I. Potočňák, A. Lüköová, E. Samol'ová
KOMPLEKSI PALADIJUMA SA 7-BROMO-HINOLIN-8-OL..... 16

I. Potočňák, A. Lüköová, E. Samoľová PALLADIUM COMPLEXES WITH 7-BROMO-QUINOLIN-8-OL.....	17
N. Milojković, M. Orlić, J. Dikić, M. Žunić, B. Simović, A. Dapčević CINK-ORTOTITANAT SA ANTIBAKTERIJSKIM SVOJSTVIMA.....	18
N. Milojković, M. Orlić, J. Dikić, M. Žunić, B. Simović, A. Dapčević ANTIBACTERIAL ZINC ORTHOTITANATE.....	19
Nikola Radnović, Chris Hawes, Marko Rodić SINTEZA I STRUKTURA KOMPLEKSA Cu(II) SA BIS(4-KARBOKSI-BENZIL) AMONIJUM-HLORIDOM.....	20
Nikola Radnović, Chris Hawes, Marko Rodić SYNTHESIS AND STRUCTURE OF Cu(II) COMPLEX WITH BIS(4-CARBOXY-BENZYL) AMMONIUM CHLORIDE.....	21
POSTERSKA SAOPŠTENJA - POSTER PRESENTATIONS	
К. Гак Симић, А. Лазић, Ј. Радовановић, Ј. Роган, Г. Јањић, И. Ђорђевић, Н. Тришовић СУПРАМОЛЕКУЛСКА ОРГАНИЗАЦИЈА 3-(4-ХЛОРБЕНЗОИЛ)-1,3-ДИАЗА- СПИРО[4.5]ДЕКАН-2,4-ДИОНА.....	24
К. Gak Simić, A. Lazić, L. Radovanović, J. Rogan b, G. Janjić, I. Đorđević, N. Trišović SUPRAMOLECULAR ASSOCIATION IN 3-(4-CHLOROBENZOYL)-1,3- DIAZASPIRO[4.5]DECANE-2,4- DIONE.....	25
Т. Адејумо, Д. Радановић, М. Златар, М. Груден, К. Анђелковић, Б. Чобелјић СИНТЕЗА, КАРАКТЕРИЗАЦИЈА И DFT ПРОРАЧУНИ БИНУКЛЕАРНОГ КОМПЛЕКСА Mn(II) СА ШИФОВИМ БАЗАМА.....	26
T. Adejumo, D. Radanović, M. Zlatar, M. Gruden, K. Andelković, B. Čobeljić SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND DFT CALCULATIONS OF DINUCLEAR SCHIFF BASE Mn(II) COMPLEX.....	27
D. Stojković, V. Jevtić, Đ. Petrović, S. Jovičić Milić, N. Vuković, M. Vukić, M. Đukić, O. Klisurić SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA 2-ACETILBUTIROLAKTONA SA METIL ESTROM L-TRIFTOFANA.....	28
D. Stojković, V. Jevtić, Đ. Petrović, S. Jovičić Milić, N. Vuković, M. Vukić, M. Đukić, O. Klisurić SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF 2-ACETYLBUTYROLACTONE WITH METHYL ESTER OF L-TRYPTOPHANE.....	29
Đ. Petrović, V. Jevtić, S. Jovičić Milić, D. Stojković, O. Klisurić SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA PROPILENDIAMIN-N,N'-DI-2-(3-METIL)- BUTANSKE KISELINE.....	30

Đ. Petrović, V. Jevtić, S. Jovičić Milić, D. Stojković, O. Klisurić SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF PROPYLENEDIAMINE- <i>N,N'</i> -DI-2-(3-METHYL)-BUTANOATE ACID.....	31
E. H. Avdović, K. Molčanov, Ž. B. Milanović, M. Antonijević, D. Simijonović, D. Milenković, Z. S. Marković SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA (E)-3-(1-((4-HIDROKSI-3-METOKSIFENIL)AMINO)-ETILIDEN) HROMAN-2,4-DIONA.....	32
E. H. Avdović, K. Molčanov, Ž. B. Milanović, M. Antonijević, D. Simijonović, D. Milenković, Z. S. Marković SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE (E)-3-(1-((4-HYDROXY-3-METHOXYPHENYL)AMINO)-ETHYLIDENE) CHROMANE-2,4-DIONE.....	33
G. Janjić, I. Đorđević, A. Lazić, L. Radovanović, M. Petković-Benazzouz, J. Rogan, N. Trišović UTICAJ HALOGENOVANJA AROMATIČNOG PRSTENA NA KONFORMACIJU SPIROHIDANTOINSKIH JEDINJENJA.....	34
G. Janjić, I. Đorđević, A. Lazić, L. Radovanović, M. Petković-Benazzouz, J. Rogan, N. Trišović INFLUENCE OF HALOGENATION OF AROMATIC RING ON THE CONFORMATION OF SPIROHYDANTOIN COMPOUNDS.....	35
J. Ladarević, L. Radovanović, B. Božić, A. Mašulović, J. Rogan, D. Mijin KRISTALNA STRUKTURA I ANTIOKSIDATIVNA AKTIVNOST Cu(II) KOMPLEKSA AZO PIRIDONSKE BOJE.....	36
J. Ladarević, L. Radovanović, B. Božić, A. Mašulović, J. Rogan, D. Mijin CRYSTAL STRUCTURE AND ANTIOXIDANT ACTIVITY OF Cu(II) COMPLEX OF AZO PYRIDONE DYE.....	37
Јована Арашков, Александар Вишњевац, Тамара Тодоровић, Ненад Филиповић МОЛЕКУЛСКЕ И КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ КОМПЛЕКСА Zn(II) СА ТИАЗОЛИЛ-ХИДРАЗОНИМА.....	38
Jovana Araškov, Aleksandar Višnjevac, Tamara Todorović, Nenad Filipović MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF Zn(II) COMPLEXES WITH THIAZOLYL-HYDRAZONES.....	39
М. Јевтовић, Н. Стевановић, Д. Радановић, Д. Сладић, К. Анђелковић, Б. Чобелјић КОМПЛЕКСИ Zn(II) СА ШИФОВИМ БАЗАМА КООРДИНАЦИОНОГ БРОЈА ПЕТ.....	40
M. Jevtović, N. Stevanović, D. Radanović, D. Sladić, K. Anđelković, B. Čobeljić SCHIFF BASE Zn(II) COMPLEXES WITH COORDINATION NUMBER FIVE.....	41
L. Radovanović, I. Đorđević, M. V. Rodić, J. Rogan KRISTALNA STRUKTURA KOKRISTALA 2,2'-DIPYRIDILAMIN-DIETIL-BARBITURNE KISELINE.....	42

L. Radovanović, I. Đorđević, M. V. Rodić, J. Rogan CRYSTAL STRUCTURE OF 2,2'-DIPYRIDYLAMINE-DIETHYLBARBITURIC ACID CO-CRYSTAL.....	43
Lj. Suručić, T. Tadić, A. Nastasović, B. Marković, Z. Sandić, A. Onjia, G. Janjić ZAMENA SUMPORA SELENOM. EFEKAT POLARNIH GRUPA IZ OKRUŽENJA.....	44
Lj. Suručić, T. Tadić, A. Nastasović, B. Marković, Z. Sandić, A. Onjia, G. Janjić SUBSTITUTION OF SULFUR BY SELENIUM. EFFECT OF POLAR GROUPS FROM THE ENVIRONMENT.....	45
Љ. Кузмановић, М. Ковачевић ПРИМЕНА ФОТОНСКИХ КРИСТАЛА У ОПТИЧКИМ ВЛАКНИМА.....	46
Lj. Kuzmanović, M. Kovačević APPLICATION OF PHOTONIC CRYSTALS IN OPTICAL FIBERS.....	47
M. Petković Benazzouz, A. Rakić, N. Trišović, G. Janjić, M. Sarvan FLUORINACIJA AROMATIČNIH GRUPA. EFEKAT KOORDINOVANJA NA ATOM FLUORA.....	48
M. Petković Benazzouz, A. Rakić, N. Trišović, G. Janjić, M. Sarvan FLUORINATION OF AROMATIC GROUPS. THE EFFECTS OF COORDINATION ON FLUORINE INTERACTIONS.....	49
Марко Радовановић, Марија Ристић, Маја Ђукић, Игњат Филиповић, Frank W. Heinemann, Зоран Матовић СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА <i>cis</i> -equatorial-Na[Rh(Hed3ap)Cl]·2,22H ₂ O КОМПЛЕКСА.....	50
Marko Radovanović, Marija Ristić, Maja Đukić, Ignjat Filipović, Frank W. Heinemann, Zoran Matović SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF <i>cis</i> -equatorial- Na[Rh(Hed3ap)Cl]·2,22H ₂ O COMPLEX.....	51
M. Harmošová, E. Samořová, M. Litecká, N. Kuncová, I. Potočňák MOLEKULSKI, JONSKI I POLIMERNI KOMPLEKSI CINKA SA NITRODERIVATIMA HINOLIN-8-OL.....	52
M. Harmošová, E. Samořová, M. Litecká, N. Kuncová, I. Potočňák MOLECULAR, IONIC AND POLYMERIC COMPLEXES OF ZINC WITH NITRODERIVATIVES OF QUINOLIN-8-OL.....	53
M. Matiková Mařarová, K. Lacková, I. Potočňák STRUKTURNA RAZLIČITOST Cu(II)-phen-C(CN) ₃ SISTEMA.....	54
M. Matiková Mařarová, K. Lacková, I. Potočňák STRUCTURAL DIVERSITY OF Cu(II)-phen-C(CN) ₃ SYSTEM.....	55
Н. Јовић Орсини, М. М. Милић ЦИНКОМ СУПСТИТУИСАНЕ НАНОЧЕСТИЦЕ ГВОЖЂЕ ОКСИДА ОБЛИКА ОБЛУТКА ЗА МАГНЕТНУ ХИПЕРТЕРМИЈУ - ИЗ ОРГАНСКЕ У ВОДЕНУ СУСПЕНЗИЈУ ГРАЂЕЊЕМ TiO ₂ -ГВОЖЂЕ ОКСИД КОМПОЗИТА.....	56

<p>N. Jović Orsini, M. M. Milić ZINC SUBSTITUTED IRON OXIDE NANOPEBBLES FOR MAGNETIC HYPERTHERMIA FROM ORGANIC TO AQUEOUS MEDIUM BY BUILDING TiO₂-IRON OXIDE COMPOSITES.....</p>	57
<p>Н. Даниловић, А. Јанићијевић, Т. Б. Миладиновић КРИСТАЛИЗАЦИОНА ПОЛИЦА.....</p>	58
<p>N. Danilović, A. Janićijević, T. B. Miladinović CRYSTALLIZATION SHELF.....</p>	59
<p>N. Stevanović, J. Kljun, T. Andrejević, D. Ašanin, I. Turel, M. Djuran, B. Glišić SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA KOMPLEKSA SREBRA(I) SA ANTIFUNGALNIM AGENSOM EKONZOLOM.....</p>	60
<p>N. Stevanović, J. Kljun, T. Andrejević, D. Ašanin, I. Turel, M. Djuran, B. Glišić SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF A SILVER(I) COMPLEX WITH ANTIFUNGAL AGENT ECONAZOLE.....</p>	61
<p>T. P. Andrejević, J. Kljun, D. P. Ašanin, N. Lj. Stevanović, I. Turel, M. I. Djuran, B. Đ. Glišić SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA KOMPLEKSA SREBRA(I) SA DIMETIL 6-(PIRAZIN-2-IL)PIRIDIN-3,4-DIKARBOKSILATOM.....</p>	62
<p>T. P. Andrejević, J. Kljun, D. P. Ašanin, N. Lj. Stevanović, I. Turel, M. I. Djuran, B. Đ. Glišić SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF A SILVER(I) COMPLEX WITH DIMETHYL 6-(PYRAZIN-2-YL)PYRIDINE-3,4-DICARBOXYLATE.....</p>	63
<p>Предраг Ристић, Павле Павловић, Марија Станишић, Радивоје Продановић, Милош Огњановић, Вељко Ђокић, Тамара Тодоровић УТИЦАЈ АНЈОНА, ПУФЕРА И ДЕТЕРГЕНТА НА ТОПОЛОГИЈУ И МОРФОЛОГИЈУ ZIF-8 КРИСТАЛИТА.....</p>	64
<p>Predrag Ristić, Pavle Pavlović, Marija Stanišić, Radivoje Prodanović, Miloš Ognjanović, Veljko Đokić, Tamara Todorović INFLUENCE OF ANIONS, BUFFER AND DETERGENT ON TOPOLOGY AND MORPHOLOGY OF ZIF-8 CRYSTALLITES.....</p>	65
<p>S. Jovičić Milić, V. Jevtić, Đ. Petrović, D. Stojković, N. Vuković, M. Vukić, O. Klisurić, M. Kačaniová SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA KOMPLEKSA PALADIJUM(II) JONA SA 2-AMINO-6-HLOROBENZOTIAZOLOM.....</p>	66
<p>S. Jovičić Milić, V. Jevtić, Đ. Petrović, D. Stojković, N. Vuković, M. Vukić, O. Klisurić, M. Kačaniová SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE COMPLEX OF PALLADIUM(II) ION WITH 2-AMINO-6-CHLOROBENZOTIAZOLE.....</p>	67
<p>С. Марковић, А. Вишњевац, Т. Тодоровић, Н. Филиповић МОЛЕКУЛСКЕ И КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ КОМПЛЕКСА Cd(II) СА ТИАЗОЛИЛ-ХИДРАЗОНИМА.....</p>	68

S. Marković, A. Višnjevac, T. Todorović, N. Filipović MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF Cd(II) COMPLEXES WITH THIAZOLYL-HYDRAZONES.....	69
С. Б. Новаковић, Г. А. Богдановић, З. Д. Петровић, Д. Симијонових, В. М. Миловановић, Ј. Бранковић, В. П. Петровић КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ ДВА МЕТОКСИБЕНЗЕН-ПИРАЗОЛОНСКА ДЕРИВАТА.....	70
S. B. Novaković, G. A. Bogdanović, Z. D. Petrović, D. Simijonović, V. M. Milovanović, J. Branković, V. P. Petrović CRYSTAL STRUCTURES OF TWO METHOXYBENZENE-PYRAZOLONE DERIVATIVES.....	71
B. Simović, G. Branković, A. Dapčević FOTOKATALITIČKA RAZGRADNJA BOJE RO16 POMOĆU HIDROTHERMALNO SINTETISANIH KOMPOZITA CeO ₂ /ZnO.....	72
B. Simović, G. Branković, A. Dapčević PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF RO16 DYE USING HYDROTHERMALLY SYNTHESIZED CeO ₂ /ZnO COMPOSITES.....	73
М. М. Милић УРЕЂЕЊЕ КИСЕОНИКА И ФОРМИРАЊЕ –U ЦЕНТАРА У YBa ₂ Cu ₃ O _{6+x} СУПЕРПРОВОДНИКУ.....	74
М. М. Milić OXYGEN ORDERING AND FORMATION OF –U CENTERS IN THE YBa ₂ Cu ₃ O _{6+x} SUPERCONDUCTOR.....	75
М. Milojević, B. Maksimović, B. Vučetić, M. Mitrović, A. Žekić UTICAJ MAGNETNOG POLJA NA RASPODELE BRZINA RASTA MALIH KRISTALA NATRIJUM-HLORATA.....	76
M. Milojević, B. Maksimović, B. Vučetić, M. Mitrović, A. Žekić INFLUENCE OF MAGNETIC FIELD ON GROWTH RATE DISTRIBUTIONS OF SMALL SODIUM CHLORATE CRYSTALS.....	77
Д. Б. Нинковић, А. Б. Ђуновић, Д. Ж. Вељковић УТИЦАЈ ХАЛОГЕНОГ ВЕЗИВАЊА НА ОСЕТЉИВОСТ КА ДЕТОНАЦИЈИ ВИСОКОЕНЕРГЕТСКИХ МОЛЕКУЛА.....	78
D. B. Ninković, A. B. Đunović, D. Ž. Veljković INFLUENCE OF HALOGEN BONDING ON THE SENSITIVITY OF HIGH-ENERGY MOLECULES TOWARDS DETONATION.....	79
М. Russin, A. Lüköová, S. Drweesh, E. Samol'ová, M. Litecká, I. Potočňák JONSKI KOMPLEKSI PALADIJUMA SA 5-HLORO-8-HIDROKSIHINOLINOM I RAZLIČITIM KATJONIMA.....	80
M. Russin, A. Lüköová, S. Drweesh, E. Samol'ová, M. Litecká, I. Potočňák IONIC PALLADIUM COMPLEXES WITH 5-CHLORO-8-HYDROXYQUINOLINE AND DIFFERENT CATIONS.....	81

CONTENT

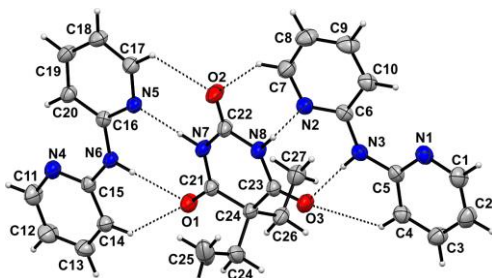
M. M. Radanović, M. V. Rodić, Lj. S. Vojinović-Ješić, M. S. Kostić, D. Gazdić, V. M. Leovac SINTEZA I STRUKTURA TETRANUKLEARNOG KOMPLEKSA CINKA SA ŠIFOVOM BAZOM AMINOGVANIDINA.....	82
M. M. Radanović, M. V. Rodić, Lj. S. Vojinović-Ješić, M. S. Kostić, D. Gazdić, V. M. Leovac SYNTHESIS AND STRUCTURE OF TETRANUCLEAR ZINC COMPLEX WITH SCHIFF BASE OF AMINOGUANIDINE.....	83
P. Dabić, S. Kovač, A. Kremenović KRISTALNE STRUKTURE $Cs_2HoSi_4O_{10}F$ I $Cs_2TmSi_4O_{10}F$	84
P. Dabić, S. Kovač, A. Kremenović CRYSTAL STRUCTURES OF $Cs_2HoSi_4O_{10}F$ AND $Cs_2TmSi_4O_{10}F$	85

KRISTALNA STRUKTURA KOKRISTALA 2,2'-DIPIRIDILAMIN–DIETIL-BARBITURNE KISELINE

L. Radovanović^a, I. Đorđević^b, M. V. Rodić^c, J. Rogan^d

^a Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija; ^b Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija; ^c Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu, Novi Sad, Srbija; ^d Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija
e-mail: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

Dietil derivat barbiturne kiseline (H₂debarb) pripada klasi lekova koji se koriste u lečenju anksioznosti, epilepsije i nekih psihijatrijskih poremećaja i predstavlja jak donor vodonične veze preko dve –NH grupe, kao i slab akceptor preko tri karbonilna O-atoma [1]. 2,2'-Dipiridilamin (dipya) je organska baza sa svojstvom prenosa naelektrisanja koja se može javiti u nekoliko protonovanih oblika i uspostaviti jedan od devet načina koordinacije [2]. Kokristal (H₂debarb)(dipya)₂, **1**, dobijen je metodom isparavanja rastvarača iz H₂O/EtOH reakcione smeše koja je sadržala Na(Hdebarb) i dipya u molskom odnosu 1:1. Rendgenska strukturna analiza pokazala je da se asimetrična jedinica **1** sastoji od jedne H₂debarb i dve dipya jedinice povezane jakim N/C–H···O/N interakcijama (slika 1). Glavna strukturna karakteristika **1** jeste sloj formiran preko N/C–H···O/N interakcija, dok su između slojeva uočene slabe π···π interakcije. Izračunate površine elektrostatičkog potencijala molekula **1** pokazale su najelektrofilnije i najnukleofilne delove, dok su Hiršfildova površina (slika 2) i 2D grafički prikazi otisaka omogućili analizu intermolekulskih interakcija i kvantifikaciju doprinosa različitih intermolekulskih kontakata prisutnih u kristalnoj strukturi.



Slika 1. Asimetrična jedinica kokristala **1**. Termalni elipsoidi nacrtani su sa verovatnoćom 30 %.

Kristalografski podaci: C₂₈H₃₀N₈O₃, $M_r = 526,6$, trikliničan sistem, prostorna grupa $P-1$, $a = 11,4015(5)$, $b = 12,1485(4)$, $c = 12,1839(5)$ Å, $\alpha = 70,012(3)$, $\beta = 64,655(4)$, $\gamma = 64,500(4)$ °, $V = 1350,68(11)$ Å³, $Z = 2$, $F(000) = 556$, $\rho_x = 1,295$ g cm⁻³, $\mu(\text{Mo } K\alpha) = 0,088$ mm⁻¹. Utačnjavanje sa F^2 (358 parametara) dalo je $R_1 = 0,0555$, $wR_2 = 0,1099$, $S = 1,029$ za sve podatke i $R_1 = 0,041$ za 3835 uočenih refleksija sa $I \geq 2\sigma(I)$.

[1] K.T. Mahmudov, M.N. Kopylovich, A.M. Maharramov, M.M. Kurbanova, A.V. Gurbanov, A.J.L. Pombeiro, *Coordination Chemistry Reviews*, **265** (2014) 1–37.

[2] D.W. Brogden, J.F. Berry, *Comments on Inorganic Chemistry*, **36** (2016) 17–37.

CRYSTAL STRUCTURE OF 2,2'-DIPYRIDYLAMINE– DIETHYLBARBITURIC ACID CO-CRYSTAL

L. Radovanović^a, I. Đorđević^b, M. V. Rodić^c, J. Rogan^d

^a Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; ^b Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; ^c Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Novi Sad, Serbia; ^d Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia
e-mail: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

Diethyl derivative of barbituric acid (H₂debarb), that belongs to a class of drugs used in treatment of anxiety, epilepsy and some psychiatric disorders, is strong hydrogen bond donor *via* two –NH groups and weak acceptor through its three carbonyl O atoms [1]. 2,2'-Dipyridylamine (dipya) is a charge transfer organic base that can exist in several protonation states adopting one of nine coordination modes [2]. A co-crystal (H₂debarb)(dipya)₂, **1**, was prepared by solvent evaporation method from the H₂O/EtOH reaction mixture containing Na(Hdebarb) and dipya in molar ratio 1:1. The single crystal X-ray analysis revealed that asymmetric unit of **1** is comprised of one H₂debarb and two dipya moieties connected by strong N/C–H···O/N interactions (Figure 1). The main structural feature is layer formed by N/C–H···O/N interactions, while among the layers the weak $\pi\cdots\pi$ stacking interactions were observed. Computed the molecular electrostatic potential surfaces of **1** revealed the most electrophilic and nucleophilic parts, while the Hirshfeld surfaces (Figure 2) and 2D fingerprint plots enabled the analysis of intermolecular interactions and quantify the contribution of various intermolecular contacts present in the crystal structure of **1**.

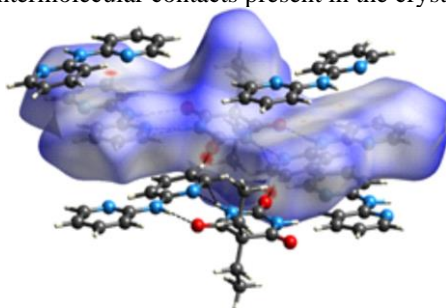


Figure 2. Interactions and calculated Hirshfeld surface in **1**.

Crystal data: C₂₈H₃₀N₈O₃, $M_r = 526.6$, triclinic system, space group $P\bar{1}$, $a = 11.4015(5)$, $b = 12.1485(4)$, $c = 12.1839(5)$ Å, $\alpha = 70.012(3)$, $\beta = 64.655(4)$, $\gamma = 64.500(4)$ °, $V = 1350.68(11)$ Å³, $Z = 2$, $F(000) = 556$, $\rho_x = 1.295$ g cm⁻³, $\mu(\text{Mo } K\alpha) = 0.088$ mm⁻¹. The refinement on F^2 (358 parameters) yielded $R_1 = 0.0555$, $wR_2 = 0.1099$, $S = 1.029$ for all data, and $R_1 = 0.041$ for 3835 observed reflections with $I \geq 2\sigma(I)$.

[1] K.T. Mahmudov, M.N. Kopylovich, A.M. Maharramov, M.M. Kurbanova, A.V. Gurbanov, A.J.L. Pombeiro, *Coordination Chemistry Reviews*, **265** (2014) 1–37.

[2] D.W. Brogden, J.F. Berry, *Comments on Inorganic Chemistry*, **36** (2016) 17–37.