

**Srpsko hemijsko društvo**  
Serbian Chemical Society



**52. SAVETOVANJE  
SRPSKOG HEMIJSKOG  
DRUŠTVA**

**PROGRAM**

**i**

**KRATKI IZVODI RADOVA**

**52<sup>nd</sup> Meeting of  
the Serbian Chemical Society**

**Program  
&**

**Book of Abstracts**

**Novi Sad, 29. i 30. maj 2015.  
Novi Sad, Serbia, May 29 and 30, 2015**

CIP - Каталогizacija u publikaciji  
Narodna biblioteka Srbije, Beograd

54(048)  
577.1(048)  
66(048)  
66.017/.018(048)  
502/504(048)

СРПСКО хемијско друштво. Саветовање (52 ; 2015 ; Нови Сад)  
Program i kratki izvodi radova = Program & Book of Abstracts / 52. savetovanje Srpskog hemijskog društva, Novi Sad, 29-30. maj 2015. = 52nd Meeting of the Serbian Chemical Society, Novi Sad, Serbia, May 29-30, 2015 ; [organizator] Srpsko hemijsko društvo = [organizer] Serbian Chemical Society ; [urednici, editors] Biljana Abramović, Aleksandar Dekanski]. - Beograd : Srpsko hemijsko društvo = Serbian Chemical Society, 2015 (Beograd : Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva TMF). - IX, 154 str. ; 24 cm

Uparedo srp. tekst i engl. prevod. - Tekst ćir. i lat. - Tiraž 160. - Registar.

ISBN 978-86-7132-056-6

a) Хемија - Апстракти b) Биохемија - Апстракти c) Технологија - Апстракти d) Наука о материјалима - Апстракти e) Животна средина - Апстракти  
COBISS.SR-ID 215279628

**52. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA, NOVI SAD, 29. i 30. MAJ 2015.  
PROGRAM I KRATKI IZVODI RADOVA**

*52<sup>ND</sup> MEETING OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY, NOVI SAD, SERBIA, MAY 29 AND 30, 2015  
PROGRAM AND BOOK OF ABSTRACTS*

*Izdaje / Published by*

**Srpsko hemijsko društvo / Serbian Chemical Society**

*Karnegijeva 4/III, 11000 Beograd, Srbija*

*tel./fax: +381 11 3370 467; www.shd.org.rs, E-mail: Office@shd.org.rs*

*Za izdavača / For Publisher*

**Živoslav TEŠIĆ, predsednik Društva**

*Urednici / Editors*

**Biljana ABRAMOVIĆ**

**Aleksandar DEKANSKI**

*Dizajn korica, slog i kompjuterska obrada teksta*

*Cover Design, Page Making and Computer Layout*

**Aleksandar DEKANSKI**

*Tiraž / Circulation*

**160 primeraka / 160 Copy Printing**

**ISBN 978-86-7132-056-6**

*Štampa / Printing*

**Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva, Tehnološko-metalurški fakultet,  
Karnegijeva 4, Beograd, Srbija**

**Naučni Odbor**  
*Scientific Committee*  
**Biljana ABRAMOVIĆ, predsednik**  
**Jelena BAJAT**  
**Goran BOŠKOVIĆ**  
**Tatjana VOLKOV-HUSOVIĆ**  
**Sanja GRGURIĆ ŠIPKA**  
**Branko DUNJIĆ**  
**Ljiljana JOVANOVIĆ**  
**Suzana JOVANOVIĆ ŠANTA**  
**Ivan JURANIĆ**  
**Zorica KNEŽEVIĆ-JUGOVIĆ**  
**Vukadin LEOVAC**  
**Bojan RADAK**  
**Maja RADETIĆ**  
**Slavica RAŽIĆ**  
**Dušan SLADIĆ**  
**Dragana STANIĆ VUČINIĆ**  
**Dragica TRIVIĆ**  
**Janoš ČANADI**



**Organizacioni Odbor**  
*Organising Committee*  
**Daniela ŠOJIĆ – predsednik**  
**Aleksandar DEKANSKI**  
**Slavko KEVREŠAN**  
**Goran BOŠKOVIĆ**  
**Nina FINČUR**  
**Sanja PANIĆ**  
**Boris POPOVIĆ**  
**Milan VRANEŠ**  
**Vesna DESPOTOVIĆ**  
**Nemanja BANIĆ**  
**Sanja ARMAKOVIĆ**  
**Marina DAVID**  
**Ružica ŽDERO**



**Svetovanje su podržali / Supported by**



**Ministarstvo prosvete, nauke i tehnološkog razvoja**  
**Republike Srbije**  
*Ministry of Education, Science and Technological Development*  
*of Republic of Serbia*



**Pokrajinski sekretarijat za nauku i tehnološki razvoj**  
**Autonomne pokrajine Vojvodine**  
*Provincial Secretariat for Science and Technological Development of*  
*Autonomous Province of Vojvodina*



***Ova knjiga sadrži kratke izvode  
tri plenarna predavanja (PP),  
tri predavanja po pozivu (PPP) i  
137 saopštenja prihvaćenih  
za prezentovanje na Savetovanju,  
od čega 12 usmenih (O) i 125 postera (P).***

***Zbornik radova (svaki rad u obimu do četiri stranice)  
publikovan je na kompakt disku (CD),  
kao sastavni deo materijala Savetovanja.  
Radovi koji su publikovani na disku  
u ovoj knjizi su označeni simbolom***



***na desnoj strani iznad naslova rada.***

***This book contains short abstracts of  
3 Plenary Lectures (PP),  
3 Invited Lectures (PPP),  
137 contributions accepted  
for the presentation at the Meeting,  
of which 12 oral (O) and 126 poster (P) presentations***

***The Proceedings of the papers (consisting of four pages)  
are published on compact-disk (CD),  
as an integral part of the Meeting material.  
The papers published on the CD are designed in this book by***



***symbol on the right side above the paper title.***



**KRATKI IZVODI  
ABSTRACTS**

OH P 17

**Eksperimentalna i kvantnohemijska proučavanja strukture  
3-(4-supstituisanih benzil)-1,3-diazaspiro[4.4]nonan-2,4-diona**

Anita M. Lazić, Bojan Đ. Božić, Vesna D. Vitnik\*, Željko J. Vitnik\*, Nataša V. Valentić,  
Gordana S. Ušćumlić

*Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija  
\*IHTM, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 12-16, Beograd, Srbija*

U radu je sintetizovana serija 3-(4-supstituisanih benzil)-1,3-diazaspiro[4.4]nonan-2,4-diona čija je struktura određena temperaturama topljenja, FT-IR, <sup>1</sup>H i <sup>13</sup>C NMR i UV/Vis spektroskopijom. Uticaj supstituenata na apsorpcione spektre spirohidantoina, u različitim rastvaračima, proučavan je Hametovom jednačinom. Eksperimentalni rezultati su pokazali zadovoljavajuću saglasnost sa rezultatima kvantnohemijskih proračuna dobijenih primenom DFT metode. Pokazano je da supstituenti značajno utiču na intramolekulski transfer naelektrisanja (ICT) kao i na reaktivnost proučavanih hidantoina razmatranu na osnovu molekuskog elektrostatičkog potencijala (MEP).

**Experimental and quantum chemical studies on the structure of  
3-(4-substituted benzyl)-1,3-diazaspiro[4.4]nonane-2,4-dione**

Anita M. Lazić, Bojan Đ. Božić, Vesna D. Vitnik\*, Željko J. Vitnik\*, Nataša V. Valentić,  
Gordana S. Ušćumlić

*Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia  
\*ICTM, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia*

In this work, a series of 3(4-substituted benzyl)-1,3-diazaspiro[4.4]nonane-2,4-dione was synthesized and fully characterized by melting points, FT-IR, <sup>1</sup>H, and <sup>13</sup>C NMR and UV/Vis spectroscopy. The Hammett equation was used to quantitatively evaluate the effects of substituents on the absorption frequencies in different solvents. The experimental results showed very good agreement with quantum chemical calculations obtained using DFT method. It was shown that substituents change the extent of conjugation, and affect intramolecular charge transfer (ICT) character. To estimate chemical reactivity of the molecules, the molecular electrostatic potential (MEP) surface maps were calculated for the optimized geometries of the investigated molecules.

**Acknowledgment.** Authors are grateful to the Ministry of Education, Science and Technological Development of the Republic of Serbia (Project 172013) for the financial support of this work.