

Srpsko hemijsko društvo



Serbian Chemical Society

**56. SAVETOVANJE  
SRPSKOG HEMIJSKOG  
DRUŠTVA**

**KRATKI IZVODI  
RADOVA**

**56<sup>th</sup> MEETING OF  
THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY**  
**Book of Abstracts**

Niš 7. i 8. juni 2019.  
Niš, Serbia, June 7-8, 2019

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

СРПСКО хемијско друштво. Саветовање (56 ; 2019 ; Ниш)  
Кратки изводи радова = Book of Abstracts / 56. savetovanje Srpskog hemijskog društva , Niš 7. i  
8. juni 2019. = 56th meeting of the Serbian chemical society, Niš, Serbia, June 7-8, 2019 ;  
[редовници, editors Dušan Sladić, Niko Radulović, Aleksandar Dekanski]. - Beograd : Srpsko  
хемијско друштво = Serbian Chemical Society, 2019 (Beograd : Razvojno-istraživački centar  
графичког инженерства TMF). - 102 str. : илстр. ; 25 cm

Tekst ѡир. i lat. - Tiraž 30. - Bibliografija uz pojedine radove.

ISBN 978-86-7132-073-3

а) Хемија -- Апстракти б) Биохемија -- Апстракти в) Технологија -- Апстракти г) Наука о  
материјалима -- Апстракти д) Животна средина -- Апстракти

COBISS.SR-ID 276591116

## 56. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA

Niš, 7 i 8 juni 2019.

### KRATKI IZVODI RADOVA

56<sup>th</sup> MEETING OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY

Niš, Serbia, June 7-8, 2019

### 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](http://www.shd.org.rs), E-mail: [Office@shd.org.rs](mailto:Office@shd.org.rs)

Za izdavača / For Publisher

**Vesna Mišković STANKOVIĆ, predsednik Društva**

Urednici / Editors

**Dušan SLADIĆ**

**Niko RADULOVIĆ**

**Aleksandar DEKANSKI**

Dizajn korica, slog i kompjuterska obrada teksta

Cover Design, Page Making and Computer Layout

**Aleksandar DEKANSKI**

Tiraž / Circulation

**30 primeraka / 30 Copy Printing**

ISBN 978-86-7132-073-3

Štampa / Printing

Razvojno-istraživački центар графичког инженерства, Tehnološko-metalurški fakultet,  
Карнегијева 4, Beograd, Srbija

**Naučni Odbor**  
**Scientific Committee**

*Dušan Sladić, predsednik/chair  
Vesna Mišković-Stanković  
Niko Radulović  
Gordana Stojanović  
Snežana Tošić  
Aleksandra Pavlović  
Aleksandra Zarubica  
Tatjana Andelković  
Miloš Đuran  
Ljiljana Jovanović  
Marija Sakač  
Janoš Čanadi  
Velimir Popsavin  
Mirjana Popsavin  
Katarina Andelković  
Dragica Trivić  
Maja Gruden Pavlović  
Tanja Ćirković Veličković  
Maja Radetić*



**Organizacioni Odbor**

**Organising Committee**

*Niko Radulović, predsednik/chair  
Aleksandar Dekanski  
Danijela Kostić  
Dragan Đorđević  
Emilija Pecev Marinković  
Marija Genčić  
Ana Miltojević  
Milan Stojković  
Milan Nešić  
Milica Nikolić  
Marko Mladenović  
Dragan Zlatković  
Miljana Đorđević  
Milena Živković  
Sonja Filipović  
Milica Stevanović  
Jelena Aksi*



**Savetovanje podržalo / Supported by**



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

Ova knjiga sadrži **kratke izvode**  
dva Plenarna predavanja (**PP**),  
šest Predavanja po pozivu (**PPP**) i  
93 saopštenja prihvaćena  
za prezentovanje na **56. savetovanju SHD**,  
od čega 14 usmenih (**O**) i 79 posterskih (**P**) saopštenja.

**Radovi** (obima od najmanje četiri stranice)  
pojedinih saopštenja publikovani su elektronski,  
u posebnoj publikaciji dostupnoj na adresi:  
[www.shd.org.rs/56SHD/Knjiga-radova.pdf](http://www.shd.org.rs/56SHD/Knjiga-radova.pdf)

Na desnoj strani iznad naslova njihovih kratkih izvoda  
nalazi se informacija o tome.

This book contains **Short Abstracts** of  
2 Plenary Lectures (**PP**), 6 Invited Lectures (**PPP**) and  
93 contributions accepted  
for the presentation at the **56<sup>th</sup> SCS Meeting**,  
of which 14 oral (**O**) and 79 poster (**P**) presentations.

The **Proceedings** of some of the contributions  
are published at: [www.shd.org.rs/56SHD/Knjiga-radova.pdf](http://www.shd.org.rs/56SHD/Knjiga-radova.pdf)  
Information on this is placed on the right-hand side,  
above titles of Abstracts.

## Eksperimentalna merenja i teorijske simulacije binarnih sistema alkohola i ugljovodonika

Milana M. Zarić, Petra Imhof\*, Ivona R. Radović\*\*, Mirjana Lj. Kijevčanin\*\*

IHTM - Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerzitet u Beogradu, Srbija

\*Odsek za fiziku, Freie Universität Berlin, Nemačka

\*\*Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Srbija

Eksperimentalne i teorijske metode korišćene su za proučavanje dve smeše, 1-heksanola sa n-heksanom i cis-3-heksen-1-ola sa n-heksanom. Eksperimentalne tehnike su korišćene za određivanje dopunskih zapremina i promene viskoznosti za temperaturni opseg od 288.15K do 318.15K. Podaci o dopunskoj molarnoj zapremini ukazuju na slično ponašanje dva alkohola, 1-heksanola i cis-3-heksen-1-ola u smešama sa n-heksanom. Eksperimentalni podaci su u skladu sa simulacijom molekularne dinamike ovih smeša, pokazujući sličan broj vodoničnih veza u dve smeše. Eksperimentalni podaci o promeni viskoznosti pokazuju značajnu razliku između dve smeše, odstupanje je značajno veće za smešu cis-3-heksen-1-ol i n-heksan, što ukazuje na jaču interakciju u binarnoj smeši cis-3-heksen-1-ola i nheksana. Ovi eksperimentalni podaci su u skladu sa kvantno-hemijskim proračunima energija interakcija na molekulskom nivou. Naime, izračunate energije interakcije pokazuju da je interakcija između jednostrukih i dvostrukih veza jača, nego interakcija između dve jednostrukе veze.

## Experimental measurements and theoretical simulations of alcohol and hydrocarbon binary systems

Milana M. Zarić, Petra Imhof\*, Ivona R. Radović\*\*, Mirjana Lj. Kijevčanin\*\*

ICTM – Scientific Institution Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Serbia

\*Department of Physics, Freie Universität Berlin, Germany

\*\*Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Serbia

Experimental and theoretical methods were used to study two mixtures, 1-hexanol with n-hexane and cis-3-hexen-1-ol with n-hexane. The experimental technics were used to determine excess molar volume and viscosity deviations in the temperature range from 288.15K to 318.15K. The data of excess molar volume indicate similar behavior of the two alcohols, 1-hexanol and cis-3-hexen-1-ol in mixtures with n-hexane. The experimental data are in accordance with molecular dynamics simulation of these mixtures, showing similar number of hydrogen bonds in the two mixtures. The experimental data of viscosity deviations show difference of the two mixtures, where the deviation is significantly larger for cis-3-hexen-1-ol and n-hexane mixture, indicating stronger interactions within cis-3-hexen-1-ol and n-hexane binary mixture. These experimental data are in accordance with quantum chemical calculations on interactions energies. Namely, calculated interaction energies show that interaction between single and double bonds are stronger, than interactions between two single bonds.