

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО**  
**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА**  
**СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**27<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE**  
**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**Abstracts**

**Крагујевац – Kragujevac**  
**2021.**

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**  
**Изводи радова**

**27<sup>th</sup> 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.

## МОЛЕКУЛСКЕ И КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ КОМПЛЕКСА Zn(II) СА ТИАЗОЛИЛ-ХИДРАЗОНИМА

**Јована Арашков<sup>а</sup>, Александар Вишњевац<sup>б</sup>, Тамара Тодоровић<sup>а</sup>, Ненад Филиповић<sup>в</sup>**

<sup>а</sup>Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија;

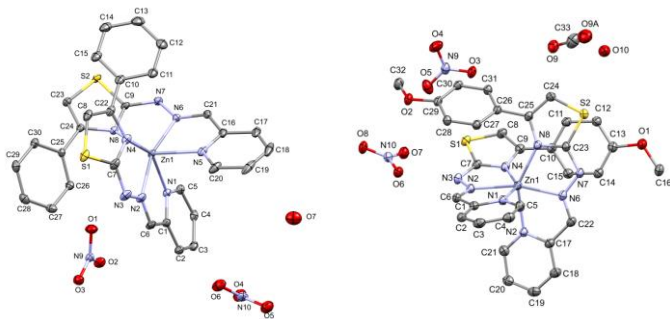
<sup>б</sup>Институт Руђер Бошковић, Бјеничка цеста 54, Загреб, Хрватска;

<sup>в</sup>Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Немањина 6, Београд – Земун, Србија

e-mail: araskovj@chem.bg.ac.rs

Нови комплекси цинка(II) са лигандима на бази тиазолил-хидразона (HLS<sup>1</sup> и HLS<sup>2</sup>) су синтетисани директном реакцијом лиганата са Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · 4H<sub>2</sub>O у метанолу. Комплекси су добијени у облику монокристала и структура им је решена применом рендгенске структурне анализе. Комплекси [Zn(HLS<sup>1</sup>)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O (**1-NO3**) и [Zn(HLS<sup>2</sup>)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · CH<sub>3</sub>OH · H<sub>2</sub>O (**2-NO3**) имају дисторговану октаедарску геометрију при чему су за јон Zn(II) меридијално координована два неутрална лиганда (Слика 1). У спољној сфери комплекса се налазе нитратни јони и молекули кристалних растварача. Лиганди су координовани триденатно преко пиридинског, иминског и тиазоловог атома азота, формирајући два петочлана хелатна прстена око централног јона метала. Кристално паковање комплекса засновано је на класичним и некласичним водоничним интеракцијама, као и ароматичним стекинг интеракцијама. Експерименти дифракције X-зрака са узорка праха потврдили су да су добијени једнофазни производи. Анализа типова и дистрибуције нековалентних интеракција у чврстом агрегатном стању је урађена рачунарским методама конструкције Хиршфилдових површина и дводимензионалних псеудосиметричних графикана отисака прстију.

**Слика 1.** ORTEP приказ молекулске структуре **1-NO3** (лево) и **2-NO3** (десно). Термални елипсоиди су приказани са 30% вероватноће. Атоми Н су изостављени ради прегледности.



## MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF Zn(II) COMPLEXES WITH THIAZOLYL-HYDRAZONES

**Jovana Araškov<sup>a</sup>, Aleksandar Višnjevac<sup>b</sup>, Tamara Todorović<sup>a</sup>, Nenad Filipović<sup>c</sup>**

<sup>a</sup>University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup>Institute Ruđer Bošković, Bjenička cesta 54, Zagreb, Croatia; <sup>c</sup>University of Belgrade – Faculty of Agriculture, Nemanjina 6, Belgrade – Zemun, Serbia  
e-mail: araskovj@chem.bg.ac.rs

New zinc (II) complexes with thiazolyl-hydrazone-based ligands (HLS<sup>1</sup> and HLS<sup>2</sup>) were synthesized by direct reaction of ligands with Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · 4H<sub>2</sub>O in methanol. The complexes were obtained in the form of single crystals and their structures were solved by X-ray structural analysis. Complexes [Zn(HLS<sup>1</sup>)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O (**1-NO3**) and [Zn(HLS<sup>2</sup>)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · CH<sub>3</sub>OH · H<sub>2</sub>O (**2-NO3**) have a distorted octahedral geometry with two neutral meridionally coordinated ligands (Figure 1). In the outer sphere of the complexes there are nitrate ions and molecules of crystalline solvents. The ligands were coordinated tridentally *via* the pyridine, imine, and thiazole nitrogen atoms, forming two five-membered chelate rings around the central metal ion. The crystal packaging of the complex is based on classical and non-classical hydrogen interactions, as well as aromatic stacking interactions. Powder X-ray diffraction experiments confirmed that single-phase products were obtained. The analysis of types and distribution of noncovalent interactions in the solid state was performed by computational methods of construction of Hirshfeld surfaces and two-dimensional pseudo-symmetric fingerprint plots.

**Figure 1.** ORTEP drawings of molecular structures of **1-NO3** (left) and **2-NO3** (right). Thermal ellipsoids are shown at the 30% probability level. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

