

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**28th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Чачак – Čačak
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

**28th 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

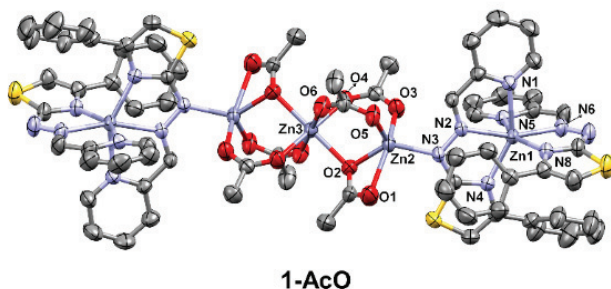
Belgrade
2023

МОНОНУКЛЕАРНИ И ПЕНТАНУКЛЕАРНИ Zn(II) КОМПЛЕКСИ СА ХИДРАЗОНИЛ-ТИАЗОЛИМА: СТРУКТУРНА И ФОТОФИЗИЧКА СТУДИЈА

Ј. Арашков ^а, П. Ристић ^а, А. Вишњевац ^б, Ј. М. López-de-Luzuriaga ^в,
Т. Годоровић ^а, Н. Филиповић ^г

^а Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија; ^б Институт Руђер Бошковић, Бјеничка цеста 54, Загреб, Хрватска; ^в Universidad de La Rioja, Centro de Investigación en Síntesis Química (CISQ), Complejo Científico-Tecnológico, 26004 Logroño, España; ^г Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Немањина 6, Београд-Земун, Србија
e-mail: nenadf@agrif.bg.ac.rs

Јефтина, нискотоксична координациона једињења Zn(II) представљају обећавајуће кандидате за различите примене, укључујући фотолуминесцентне материјале. У овом раду су представљена два комплекса Zn(II) са хидразонил-тиазолским лигандима на бази пиридина (HLS¹ и HLS²), који су синтетисани директном реакцијом лиганата и Zn(CH₃COO)₂·2H₂O. Пентануклеарни комплекс [Zn₅(HLS¹)₄(CH₃COO)₆] (**1-AcO**; Слика 1) кристалише у моноклиничној *P*₂₁/*n* просторној групи са половином молекула по асиметричној јединици, при чему се централни јон Zn(II) налази на центру инверзије (Викофово слово *c*). Мононуклеарни комплекс [Zn(HLS²)(CH₃COO)(H₂O)] (**2-AcO**; Слика 2) кристалише у триклиничној *P*-1 просторној групи са једним молекулом по асиметричној јединици. Експеримент дифракције X-зрака са узорка праха је потврдио да су добијени једнофазни производи. Урађена је детаљна анализа типова и енергетске дистрибуције интермолекулских интеракција. Симетричан комплекс **1-AcO** није фотолуминесцентан, за разлику од комплекса **2-AcO**. Квантно-механички прорачуни теорије функционала густине (DFT) и временски зависне теорије функционала густине (TD-DFT) су расветлили порекло фотолуминесцентних својстава комплекса **2-AcO**.



Слика 1. ORTEP приказ молекулске структуре **1-AcO**. Термални елипсоиди су приказани са 30 % вероватноће.

Figure 1. ORTEP drawing of molecular structure of **1-AcO**. Thermal ellipsoids are shown at 30 % of probability level.

MONONUCLEAR AND PENTANUCLEAR Zn(II) COMPLEXES WITH HYDRAZONYL-THIAZOLES: STRUCTURAL AND PHOTOPHYSICAL STUDY

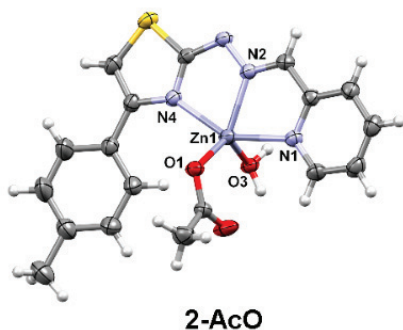
J. Araškov ^a, P. Ristić ^a, A. Višnjevac ^b, J. M. López-de-Luzuriaga ^c, T. Todorović ^a, N. Filipović ^d

^aUniversity of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;

^bInstitute Ruđer Bošković, Bjenička cesta 54, Zagreb, Croatia; ^cDepartamento de Química, Universidad de La Rioja, Centro de Investigación en Síntesis Química (CISQ), Complejo Científico-Tecnológico, 26004 Logroño, Spain; ^dUniversity of Belgrade – Faculty of Agriculture, Nemanjina 6, Belgrade – Zemun, Serbia.

e-mail: nenadf@agrif.bg.ac.rs

Inexpensive, low-toxic Zn(II) coordination compounds are represent promising candidates for various applications, including photoluminescent materials. In this study we report two zinc(II) complexes with thiazolyl-hydrazone-based ligands (HLS¹ and HLS²), which were synthesized by direct reaction of the ligands with Zn(CH₃COO)₂·2H₂O. Pentanuclear complex [Zn₅(HLS¹)₄(CH₃COO)₆] (**1-AcO**; Figure 1) crystallizes in monoclinic *P*2₁/*n* space group with half of the molecule in the asymmetric unit, where Zn3 atoms lie at inversion center (Wyckoff letter *c*). Mononuclear [Zn(HLS²)(CH₃COO)(H₂O)] (**2-AcO**; Figure 2) crystallizes in triclinic *P*-1 space group with one molecule in the asymmetric unit (Figure 2). Powder X-ray diffraction experiments confirmed that single-phase products were obtained. A detailed analysis of types and energy distribution of intermolecular interactions was performed. The symmetrical **1-AcO** does not exhibit photophysical properties, unlike asymmetrical **2-AcO**. Quantum-mechanical calculations of density functional theory (DFT) and time-dependent DFT provided insight into origin of the photoluminescent properties of **2-AcO**.



Слика 2. ORTEP приказ молекулске структуре **2-AcO**. Термални елипсоиди су приказани са 30 % вероватноће.

Figure 2. ORTEP drawing of molecular structure of **2-AcO**. Thermal ellipsoids are shown at 30 % of probability level.