

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 Glđović, 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

СИНТЕЗА, КАРАКТЕРИЗАЦИЈА И DFT ПРОРАЧУНИ БИНУКЛЕАРНОГ КОМПЛЕКСА Mn(II) СА ШИФОВИМ БАЗАМА

Т. Адејумо^а, Д. Радановић^б, М. Златар^б, М. Груден^а, К. Анђелковић^а, Б. Чобелић^а

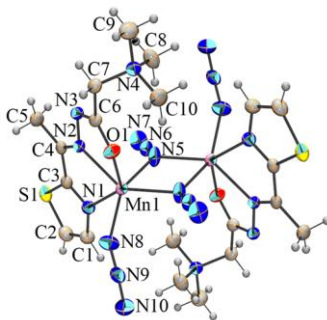
^а Хемијски факултет, Универзитет у Београду, Студентски трг 12–16, 11000 Београд, Србија

^б Универзитет у Београду – Институт за хемију, зехнологију и металургију, Центар за хемију, Вегошева 12, 11000 Београд, Србија

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

Комплекс Mn(II) добијен је у реакцији *N,N,N*-триметил-2-оксо-2-(2-(1-(тиазол-2-ил)етилиден)хидразинил)етан-1-аминијум хлорида, **HL**¹Cl, (0,25 mmol) и MnCl₂·4H₂O (0,25 mmol) у метанола. После растварања соли Mn(II), додат је NaN₃ у вишку (1 mmol). Смеша је рефлугована два сата на температури од 60 °С. Спорим упаравањем растварача у фрижидеру током 14 дана добијени су бледо-наранџасти кристали. Комплекс је окарактерисан елементалном анализом, ИЦ спектроскопијом и рендгенском структурном анализом.

Асиметрична јединица центросиметричног динуклеарног комплекса [Mn₂L₂(μ-1,1-N₃)₂(N₃)₂] састоји се од Mn(II), једног лиганда **L**¹, два азида (једног мосног и једног терминалног) и једног молекула растварача (метанола). Јон Mn(II) хексакоординован је преко три атома донора лиганда **L**¹ (N1, N2 и O1), два атома азота из мосног лиганда азида и једног атома азота терминалног лиганда азида (N8). Геометрија јона Mn(II) представља деформисану тригоналну призму (TPR-6) са Φ углом од 14.19° између парова атома N1N8, O1N2 и N5N5. Прорачуни теоријом функционала густине (енг. DFT) на ZORA-M06-2X/TZP нивоу теорије показују малу феромагнетну интеракцију између два Mn(II) центра.



SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND DFT CALCULATIONS OF DINUCLEAR SCHIFF BASE Mn(II) COMPLEX

T. Adejumo^a, **D. Radanović**^b, **M. Zlatar**^b, **M. Gruden**^a, **K. Andelković**^a, **B. Čobeljić**^a

^a Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia;

^b University of Belgrade-Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Department of Chemistry, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia;

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

The Mn(II) complex was synthesized by the reaction of *N,N,N*-trimethyl-2-oxo-2-(2-(1-(thiazol-2-yl)ethylidene)hydrazinyl)ethan-1-aminium chloride, **HL**¹Cl (0.25 mmol), and MnCl₂·4H₂O (0.25 mmol) in methanol. After complete dissolution of Mn(II) salt, NaN₃ (1 mmol) was added. The mixture was stirred for 2 h at 60 °C. After slow evaporation of solvent in refrigerator for 14 days, pale orange crystals were obtained. The complex was characterized via elemental analysis, IR spectroscopy and X-Ray.

The crystal structure of [Mn₂L¹₂(μ-1,1-N₃)₂(N₃)₂] displays a centrosymmetric binuclear complex with the asymmetric unit comprising one Mn(II) center, one ligand L¹, two azide anions (one bridging and one terminal) and one solvent (methanol) molecule. The Mn(II) ion is hexacoordinated with three donor atoms N1, N2 and O1 of ligand L¹, two nitrogen atoms from bridging azide anions, and one nitrogen atom (N8) from terminal azide anion. The polyhedron around the Mn(II) ion is described as distorted trigonal prism (TPR-6) with the twist angle Φ of 14.19° for the atom pairs N1N8, O1N2 and N5N5. Density functional theory (DFT) calculations at ZORA-M06-2X/TZP level of theory revealed weak ferromagnetic interactions between Mn(II) centers.

