

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**23rd CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Андревље – Andrevlje
2016.

**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ
КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

Издавач:
Српско кристалографско друштво,
Бушина 7, 11000 Београд,
тел./факс: 2635-217

За издавача:
Оливера Клисурић

Уредник:
Оливера Клисурић

Технички уредник:
Мирјана Радановић

уз помоћ:
Марко Родић
Љиљана Војиновић Јешић

Издавање ове публикације омогућено је
финансијском помоћи Природно-мате-
матичког факултета Универзитета у Но-
вом Саду

© Српско кристалографско друштво

ISBN 978-86-912959-3-6

Штампа:
Футура д.о.о.
Мажуранићева 46
21131 Петроварадин

Тираж: 100

Нови Сад
2016

**23rd 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:
Olivera Klisurić

Editor:
Olivera Klisurić

Technical editor:
Mirjana Radanović

with the help of:
Marko Rodić
Ljiljana Vojinović Ješić

This publication is financially supported by
the Faculty of Sciences University of Novi Sad

© Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-3-6

Printing:
Futura d.o.o.
Mažuranićeva 46
21131 Petrovaradin

Copies: 100

Novi Sad
2016

CIP - Каталогизација у публикацији
Библиотека Матице српске, Нови Сад

548/549(048.3)

СРПСКО кристалографско друштво. Конференција (23 ; 2016 ; Андrevље)

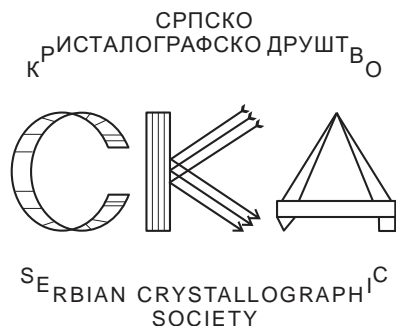
Изводи радова / XXIII конференција Српског кристалографског друштва, Андrevље, [9-11. 6.]
2016. ; [уредник Оливера Клисурић] = Abstracts / 23rd Conference of the Serbian Crystallographic Soci-
ety, Andrevlje, [9-11. 6.] 2016. ; [editor Olivera Klisurić]. - Београд : Српско кристалографско друштво,
2016 (Петроварадин : Футура). - 106 стр. : илустр. ; 25 cm

Упоредо енгл. и срп. текст. - Тираж 100.

ISBN 978-86-912959-3-6

1. Ур. ств. насл.

а) Кристалографија - Апстракти б) Минералологија - Апстракти



**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ
ДРУШТВА**

**23rd CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC
SOCIETY**

Научни одбор:

Др Дејан Полети, ТМФ, Београд
Др Јелена Роган, ТМФ, Београд
Др Љиљана Карановић, РГФ, Београд
Др Срећко Трифуновић, ПМФ, Крагујевац
Др Александар Кременовић, РГФ, Београд
Др Предраг Вулић, РГФ, Београд
Др Агнеш Капор, ПМФ, Нови Сад
Др Срђан Ракић, ПМФ, Нови Сад
Др Olivera Klisuriћ, ПМФ, Нови Сад
Др Snežana Zarić, ХФ, Београд
Др Bratislav Antić, „ВИНЧА”, Београд
Др Goran Bogdanović, „ВИНЧА”, Београд
Др Slađana Novaković, „ВИНЧА”, Београд

Scientific Committee:

Dr. Dejan Poleti, TMF, Belgrade
Dr. Jelena Rogan, TMF, Belgrade
Dr. Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade
Dr. Srećko Trifunović, PMF, Kragujevac
Dr. Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade
Dr. Predrag Vulić, RGF, Belgrade
Dr. Agneš Kapor, PMF, Novi Sad
Dr. Srđan Rakić, PMF, Novi Sad
Dr. Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad
Dr. Snežana Zarić, HF, Belgrade
Dr. Bratislav Antić, “VINČA”, Belgrade
Dr. Goran Bogdanović, “VINČA”, Belgrade
Dr. Slađana Novaković, “VINČA”, Belgrade

Организациони одбор:

Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad
Marko Rodić, PMF, Novi Sad
Ljiljana Vojinović Ješić, PMF, Novi Sad
Mirjana Radanović, PMF, Novi Sad

Organizing Committee:

Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad
Marko Rodić, PMF, Novi Sad
Ljiljana Vojinović Ješić, PMF, Novi Sad
Mirjana Radanović, PMF, Novi Sad

<u>И. М. Станковић, Д. М. Божиновски, С. Д. Зарић</u> АРОМАТИЧНО-АРОМАТИЧНЕ ИНТЕРАКЦИЈЕ У АМИЛЈОИДИМА	38
<u>I. M. Stanković, D. M. Božinovski, S. D. Zarić</u> AROMATIC-AROMATIC INTERACTIONS IN AMYLOIDS	39
<u>М. Буквић, З. Матовић, О. Клисарић</u> СИНТЕЗА, КАРАКТЕРИЗАЦИЈА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА [Ru(η^6 - <i>p</i> -cimen)Cl ₂ (5-MA-3-MorphCN-ITZ)]	40
<u>М. Đukić, Z. Matović, O. Klisurić</u> SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND CRYSTAL STRUCTURE OF COMPLEX [Ru(η^6 - <i>p</i> -cymene)Cl ₂ (5-MA-3-MorphCN-ITZ)]	41
<u>М. М. Радановић, Љ. С. Војиновић-Јешић, М. В. Родић, В. М. Леовац</u> СИНТЕЗЕ И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА КОМПЛЕКСА БАКРА(II) СА 2-АЦЕТИЛПИРИДИН-АМИНОГВАНИДИНОМ	42
<u>M. M. Radanović, Lj. S. Vojinović-Ješić, M. V. Rodić, V. M. Leovac</u> SYNTHESES AND CHARACTERIZATION OF COPPER(II) COMPLEXES WITH 2-ACETYLPIRIDINE-AMINOGUANIDINE.....	43
<u>А. Коchoвић, Д. Томовић, А. Буконјић, М. Николић, М. Мижаловић, В. Јевтић, З. Ратковић, Г. Богдановић, С. Новаковић, С. Трифуновић, Г. Радић</u> КРИСТАЛНА СТРУКТУРА БИНОКЛЕАРНОГ КОМПЛЕКСА БАКРА(II) СА S-ИЗОБУТЕНИЛ ДЕРИВАТОМ ТИОСАЛИЦИЛНЕ КИСЕЛИНЕ.....	44
<u>А. Коchoвић, Д. Томовић, А. Буконјић, М. Николић, М. Мижаловић, В. Јевтић, З. Ратковић, Г. Богдановић, С. Новаковић, С. Трифуновић, Г. Радић</u> THE CRYSTAL STRUCTURE OF BINUCLEAR COPPER(II) COMPLEX WITH S-ISOBUTENYL DERIVATIVE OF THIOSALICYLIC ACID.....	45
<u>L. D. Попов, Е. А. Распопова, С. I. Levchenkov, А. N. Morozov, I. N. Shcherbakov, А. S. Burlov, G. G. Alexandrov</u> ФЕРОЦЕНОИЛХИДРАЗОН 2- <i>N</i> -ТОЗИЛАМИНОБЕНЗАЛДЕХИДА: КРИСТАЛНА СТРУКТУРА И КВАНТНО-ХЕМИЈСКИ ПРОРАЧУНИ	46
<u>L. D. Попов, Е. А. Распопова, С. I. Levchenkov, А. N. Morozov, I. N. Shcherbakov, А. S. Burlov, G. G. Alexandrov</u> FERROCENYLHYDRAZONE OF 2- <i>N</i> -TOSYLAMINOBENZALDEHYDE: CRYSTAL STRUCTURE AND QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS.....	47
<u>Н. Р. Филиповић, А. С. Малешевић, Т. Р. Тодоровић, О. Р. Клисарић</u> КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ (2-(ПИРИДИН-2-ИЛ)-1H-ИНДОЛ-3-ИЛ)(3,4,5-ТРИМЕТОКСИФЕНИЛ)-МЕТАНОНА (HL) I NJEGOVIH КОМПЛЕКСА СА Cu(II) I Pd(II).....	48
<u>Н. Р. Филиповић, А. С. Малешевић, Т. Р. Тодоровић, О. Р. Клисарић</u> CRYSTAL STRUCTURES OF (2-(PYRIDINE-2-YL)-1H-INDOL-3-YL)(3,4,5-TRIMETHOXYPHENYL)-METHANONE (HL) AND ITS Cu(II) AND Pd(II) COMPLEXES.....	49

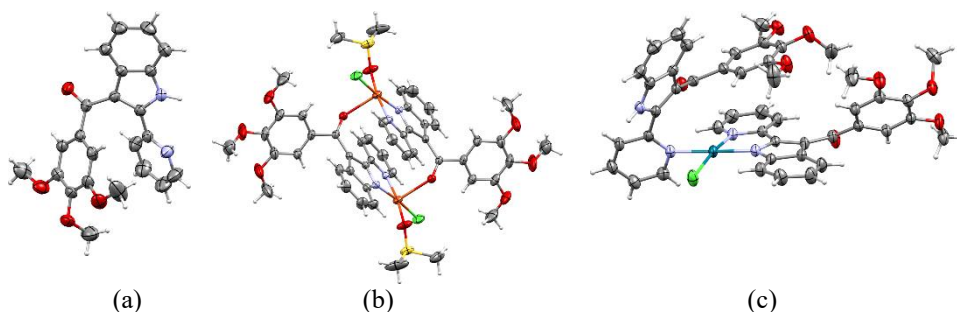
KRISTALNE STRUKTURE (2-(PIRIDIN-2-IL)-1H-INDOL-3-IL)(3,4,5-TRIMETOKSIFENIL)-METANONA (HL) I NJEGOVIH KOMPLEKSA SA Cu(II) I Pd(II)

N. R. Filipović¹, A. S. Malešević², T. R. Todorović², O. R. Klisurić³

¹Poljoprivredni fakultet, Univerzitet u Beogradu, Nemanjina 6, Beograd – Zemun; ²He-mijski fakultet, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 12-16, Beograd; ³Prirodno-mate-matički fakultet, Univezitet u Novom Sadu, Trg Dositeja Obradovića 3, Novi Sad
e-mail: nenadf.chem@gmail.com

Novi kompleksi Cu(II) i Pd(II) sa 2-(2'-piridil)-indolskim ligandom HL, modifikovanim dodatkom 3,4,5-trimetoksibenzoil grupe, sintetisani su sa ciljem dobijanja biološki aktivnih kompleksa prelaznih metala. Kompleksi su sintetisani reakcijom HL sa $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, odnosno $[\text{PdCl}_2(\text{CH}_3\text{CN})_2]$. HL i kompleksi $[\text{Cu}_2\text{L}_2\text{Cl}_2(\text{DMSO})_2]$ i $[\text{PdL}(\text{HL})\text{Cl}]$ su dobijeni u vidu monokristala i njihova struktura je rešena rendgenskom strukturnom analizom. Kompleks Cu(II) je centrosimetrični dimer sa kvadratno-piramidalnim okruženjem oko oba metalna centra, dok je kompleks Pd(II) kvadratno-planarne geometrije. Molekulske strukture liganda HL i kompleksa prikazane su na Slici 1. Kristalno pakovanje HL i njegovih kompleksa je zasnovano na vodoničnim vezama i π - π steking interakcijama.

Osnovni kristalografski podaci: HL, $\text{C}_{23}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_4$, $M_r = 388,41$, ortorombični sistem, prostorna grupa $Pbca$, $a = 12,861(5)$, $b = 16,810(5)$, $c = 18,764(5)$ Å, $V = 4057(2)$ Å³, $Z = 8$, $\rho = 1,272$ g cm⁻³, utaćnjavanje sa F^2 (270 parametra) dalo je $R_1 = 0,0681$, $wR_2 = 0,1092$, $S = 1,040$ za sve podatke i $R_1 = 0,0458$ za 2629 refleksija sa $I \geq 2\sigma(I)$. $[\text{Cu}_2\text{L}_2\text{Cl}_2(\text{DMSO})_2]$, $\text{C}_{25}\text{H}_{25}\text{ClCuN}_2\text{O}_5\text{S}$, $M_r = 564,52$, triklinični sistem, prostorna grupa $P -1$, $a = 7,7503(4)$, $b = 12,0523(7)$, $c = 13,6355(8)$ Å, $\alpha = 83,347(5)$, $\beta = 81,711(5)$, $\gamma = 89,180(4)^\circ$, $V = 1251,88(12)$ Å³, $Z = 2$, $\rho = 1,498$ g cm⁻³, utaćnjavanje sa F^2 (338 parametra) dalo je $R_1 = 0,0485$, $wR_2 = 0,0934$, $S = 1,053$ za sve podatke i $R_1 = 0,0402$ za 3839 refleksija sa $I \geq 2\sigma(I)$. $[\text{PdL}(\text{HL})\text{Cl}]$, $\text{C}_{46}\text{H}_{39}\text{ClN}_4\text{O}_8\text{Pd}$, $M_r = 917,66$, monoklinični sistem, prostorna grupa $P2_1/n$, $a = 11,8254(2)$, $b = 14,7137(2)$, $c = 23,3483(4)$ Å, $\beta = 104,498(2)^\circ$, $V = 3933,13(11)$ Å³, $Z = 4$, $\rho = 1,550$ g cm⁻³, utaćnjavanje sa F^2 (567 parametra) dalo je $R_1 = 0,0396$, $wR_2 = 0,0818$, $S = 1,051$ za sve podatke i $R_1 = 0,0307$ za 5884 refleksija sa $I \geq 2\sigma(I)$.



Slika 1. Molekulske strukture HL (a), $[\text{Cu}_2\text{L}_2\text{Cl}_2(\text{DMSO})_2]$ (b) i $[\text{PdL}(\text{HL})\text{Cl}]$ (c).

CRYSTAL STRUCTURES OF (2-(PYRIDINE-2-YL)-1H-INDOL-3-YL)(3,4,5-TRIMETHOXYPHENYL)-METHANONE (HL) AND ITS Cu(II) AND Pd(II) COMPLEXES

N. R. Filipović¹, A. S. Malešević², T. R. Todorović², O. R. Klisurić³

¹Faculty of Agriculture, University of Belgrade, Nemanjina 6, Belgrade – Zemun; ²Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, Belgrade; ³Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 3, Novi Sad
e-mail: nenadf.chem@gmail.com

Novel Cu(II) and Pd(II) complexes with 2-(2'-pyridyl)-indole ligand HL, modified with 3,4,5-trimethoxybenzoyl group, were synthesized with the aim of getting biologically active transition metal complexes. The complexes were synthesized by the reaction of HL with $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ and $[\text{PdCl}_2(\text{CH}_3\text{CN})_2]$. Single crystals of HL and complexes $[\text{Cu}_2\text{L}_2\text{Cl}_2(\text{DMSO})_2]$ and $[\text{PdL}(\text{HL})\text{Cl}]$ were obtained and their structures were determined by X-ray diffraction analysis. Cu(II) complex is a centrosymmetric dimer with square-pyramidal geometry around both metal centers, while Pd(II) complex has square-planar geometry. Molecular structures of HL and complexes are given in Fig. 1. Crystal packings of HL and its Pd(II) and Cu(II) complexes are based on hydrogen bonds and π - π stacking interactions.

The main crystallographic data: HL, $\text{C}_{23}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_4$, $M_r = 388.41$, orthorhombic system, space group $Pbca$, $a = 12.861(5)$, $b = 16.810(5)$, $c = 18.764(5)$ Å, $V = 4057(2)$ Å³, $Z = 8$, $\rho = 1.272$ g cm⁻³, refinement on F^2 (270 parameters) yielded $R_1 = 0.0681$, $wR_2 = 0.1092$, $S = 1.040$ for all data, and $R_1 = 0.0458$ for 2629 observed reflections with $I \geq 2\sigma(I)$. $[\text{Cu}_2\text{L}_2\text{Cl}_2(\text{DMSO})_2]$, $\text{C}_{25}\text{H}_{25}\text{ClCuN}_2\text{O}_5\text{S}$, $M_r = 564.52$, triclinic system, space group $P -1$, $a = 7.7503(4)$, $b = 12.0523(7)$, $c = 13.6355(8)$ Å, $\alpha = 83.347(5)$, $\beta = 81.711(5)$, $\gamma = 89.180(4)^\circ$, $V = 1251.88(12)$ Å³, $Z = 2$, $\rho = 1.498$ g cm⁻³, refinement on F^2 (338 parameters) yielded $R_1 = 0.0485$, $wR_2 = 0.0934$, $S = 1.053$ for all data, and $R_1 = 0.0402$ for 3839 for observed reflections with $I \geq 2\sigma(I)$. $[\text{PdL}(\text{HL})\text{Cl}]$, $\text{C}_{46}\text{H}_{39}\text{ClN}_4\text{O}_8\text{Pd}$, $M_r = 917.66$, monoclinic system, space group $P2_1/n$, $a = 11.8254(2)$, $b = 14.7137(2)$, $c = 23.3483(4)$ Å, $\beta = 104.498(2)^\circ$, $V = 3933.13(11)$ Å³, $Z = 4$, $\rho = 1.550$ g cm⁻³, refinement on F^2 (567 parameters) yielded $R_1 = 0.0396$, $wR_2 = 0.0818$, $S = 1.051$ for all data, and $R_1 = 0.0307$ for 5884 observed reflections with $I \geq 2\sigma(I)$.

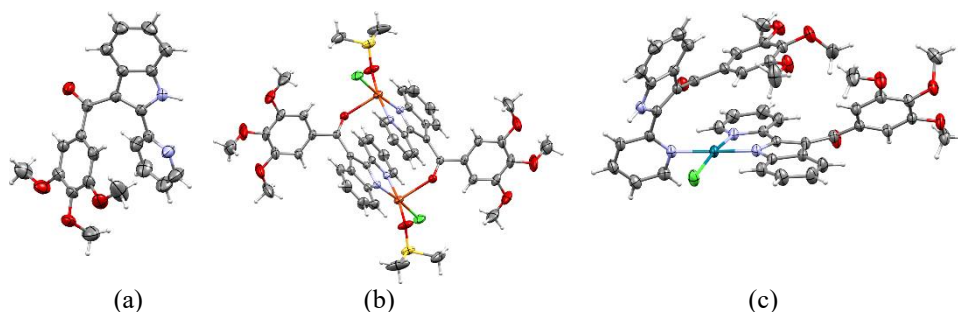


Fig. 1. Molecular structures of HL (a), $[\text{Cu}_2\text{L}_2\text{Cl}_2(\text{DMSO})_2]$ (b) and $[\text{PdL}(\text{HL})\text{Cl}]$ (c).