

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXV КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**25th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Бајина Башта – Vajina Bašta
2018.

XXV КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА
Изводи радова

25th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Abstracts

Издавач - Publisher:

- Српско кристалографско друштво
Ђушина 7, 11000 Београд, Србија, тел./факс 2635-217
- Serbian Crystallographic Society
Đušina 7, 11 000 Belgrade, Serbia, phone/fax: +381 11 2635 217

За издавача – For the publisher:

Слађана Новаковић – Sladana Novaković

Уредник – Editor:

Зоран Томић – Zoran Tomić

Технички уредник – Technical editor:

Зоран Томић – Zoran Tomić
Слађана Новаковић – Sladana Novaković

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 978-86-912959-4-3
ISSN 0354-5741

Штампа – Printing:
COPY CENTAR, Beograd

Тираж – Copies: 100
Београд – Belgrade
2018.

**XXV КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**25th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:

др Љиљана Карановић, РГФ Београд / dr Ljiljana Karanović, RGF Beograd
др Оливера Клисуринић, ПМФ Нови Сад / dr Olivera Klisurić, PMF Novi Sad
др Срећко Трифуновић, ПМФ Крагујевац / dr Srećko Trifunović, PMF Kragujevac
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, TMF Beograd
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА“ / dr Goran Bogdanović, INN "Vinča"
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, RGF Beograd
др Наташа Јовић-Орсини, ИНН „ВИНЧА“ / dr Nataša Jović-Orsini, INN "Vinča"
др Снежана Зарић, ХФ Београд / dr Snežana Zarić, HF Beograd
др Катарина Анђелковић, ХФ Београд / dr Katarina Andđelković, HF Beograd
др Срђан Ракић, ПМФ Нови Сад / dr Srdan Rakić, PMF Novi Sad
др Марин Тадић, ИНН „ВИНЧА“ / dr Marin Tadić, INN "Vinča"
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, TMF Beograd
др Предраг Вулић, РГФ Београд / dr Predrag Vulić, RGF Beograd
др Тамара Тодоровић, ХФ Београд / dr Tamara Todorović, HF Beograd

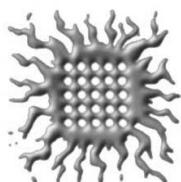
ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZATION COMMITTEE:

др Слађана Новаковић, ИНН "Винча" / dr Sladjana Novaković, INN "Vinča"
др Зоран Томић, ИНН "Винча" / dr Zoran Tomić, INN "Vinča"
др Горан Богдановић, ИНН "Винча" / dr Goran Bogdanović, INN "Vinča"
др Мирјана Милић, ИНН "Винча" / dr Mirjana Milić, INN "Vinča"
др Наташа Јовић-Орсини, ИНН "Винча" / dr Nataša Jović-Orsini, INN "Vinča"
др Марко Родић, ПМФ Нови Сад / dr Marko Rodić, PMF Novi Sad
др Виолета Николић, ИНН "Винча" / dr Violeta Nikolić, INN "Vinča"

ОРГАНИЗATORИ / ORGANIZERS



СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY



ИНСТИТУТ ЗА НУКЛЕАРНЕ НАУКЕ "ВИНЧА"
УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
VINČA INSTITUTE OF NUCLEAR SCIENCES
UNIVERSITY OF BELGRADE

ПОКРОВИТЕЉИ / SPONSORS



МИНИСТАРСТВО ПРОСВЕТЕ НАУКЕ,
И ТЕХНОЛОШКОГ РАЗВОЈА
РЕПУБЛИКЕ СРБИЈЕ
MINISTRY OF EDUCATION, SCIENCE
AND TECHNOLOGICAL
DEVELOPMENT OF THE REPUBLIC
OF SERBIA



МЕЂУНАРОДНА УНИЈА ЗА
КРИСТАЛОГРАFIЈУ
INTERNATIONAL UNION OF
CRYSTALLOGRAPHY

ROFA
GOLDEN SPONSOR

Садржај – Contents

Пленарна предавања – Plenary Lectures

Vaclav Petříček

MODULATIONS AND TWINNING – NIGHTMARE OF CRYSTALLOGRAPHERS (?)	2
---	---

Ivana Radosavljević Evans

STRUCTURAL STUDIES OF ENERGY MATERIALS: DEVELOPMENT OF ELECTROLYTES FOR SOLID OXIDE FUEL CELLS	4
--	---

Piero Macchi

CHARGE AND SPIN DENSITY IN POSITION AND MOMENTUM SPACE, DENSITY MATRICES, WAVE FUNCTIONS AND ENERGIES OF PERIODIC SYSTEMS, FROM THEORY OR EXPERIMENTS. IN ONE WORD: QUANTUM CRYSTALLOGRAPHY	5
---	---

J. Zdravković, D. Poleti, J. Rogan, D. M. Minić

MEHANIZAM I KINETIKA NEIZOTERMSKE RAZGRADNJE KOMPLEKSA METALA d-BLOKA SA BENZENPOLIKARBOKSILATO-JONIMA	6
--	---

J. Zdravković, D. Poleti, J. Rogan, D. M. Minić

MECHANISM AND KINETICS OF NON-ISOTHERMAL DEGRADATION OF d-METAL COMPLEXES WITH BENZENPOLYCARBOXYLATO IONS	7
---	---

C. Janiak

SPECIAL PROBLEMS IN METAL-ORGANIC FRAMEWORK CRYSTALLOGRAPHY	8
---	---

Z. Zhang, J-F Audibert, R. Pansu, A. Spasojevic - de Biré

NON-PHOTOCHEMICAL LASER-INDUCED NUCLEATION IN MICROFLUIDICS DEVICE	10
--	----

C. Theppitak, F. Kielar, K. Chainok

CRYSTAL ENGINEERING OF LANTHANIDE COORDINATION POLYMERS WITH HYDRAZIDE LIGANDS	11
--	----

Усмена саопштења – Oral Presentations

M. V. Rodić, S. B. Novaković, V. M. Leovac, G. A. Bogdanović PRELIMINARNI REZULTATI EKSPERIMENTALNOG ODREĐIVANJA GUSTINE NAELEKTRISANJA [Ni(L)py] (H ₂ L = S-metilizotiosemikarbazon benzoilacetona)	14
M. V. Rodić, S. B. Novaković, V. M. Leovac, G. A. Bogdanović PRELIMINARY RESULTS OF EXPERIMENTAL CHARGE DENSITY DETERMINATION OF [Ni(L)py] (H ₂ L = benzoylacetone S-methylisothiocarbzone)	15
М. Миленковић, А. Певец, Б. Чобељић, М. Стојичков, И. Турел, К. Анђелковић СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА ИЗОТИОЦИЈАНОТО КОМПЛЕКСА Zn(II) СА КОНДЕНЗАЦИОНИМ ПРОИЗВОДОМ 2-АЦЕТИЛПИРИДИНА И ЖИРАРОВОГ Т-РЕАГЕНСА	16
M. Milenković, A. Pevec, B. Čobeljić, M. Stojčkov, I. Turel, K. Andđelković SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF ISOTHIOCYANATO Zn(II) COMPLEX WITH THE CONDENSATION PRODUCT OF 2- ACETYL PYRIDINE AND GIRARD'S T-REAGENT	17
M. Fabián, V. Šepelák, P. Bottke, M. Wilkening, V. Girman MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF THE FAR-FROM-EQUILIBRIUM ZINC ALUMINATE AND ITS RESPONSE TO THERMAL TREATMENT	19
Д. Станковић, М. Огњановић, Б. Дојчиновић, Ж. Пријовић, Б. Антић РЕДУКОВАНИ ГРАФЕН ОКСИД ДЕКОРИСАН МАГНЕТИТОМ ЦВЕТНЕ МОРФОЛОГИЈЕ: СИНТЕЗА, КАРАКТЕРИЗАЦИЈА И ПРИМЕНА ЗА ПОБОЉШАНО УКЛАЊАЊЕ БОЈЕ REACTIVE BLUE 52	20
D. Stanković, M. Ognjanović, B. Dojčinović, Ž. Prijović, B. Antić SYNTHESIS, CHARACTERISATION AND APPLICATION OF Fe ₃ O ₄ NANOFLOWERS/REDUCED GRAPHENE OXIDE COMPOSITE FOR ENHANCED REMOVAL OF REACTIVE BLUE 52	21
М. М. Радановић, В. Г. Бујић, Љ. С. Војиновић-Јешић, М. В. Родић, В. М. Леовач, Ж. К. Јаћимовић СТРУКТУРЕ КОМПЛЕКСА Cd(II) СА 2-АЦЕТИЛПИРИДИН- АМИНОГВАНИДИНОМ И ПСЕУДОХАЛОГЕНИДИМА КАО МОСТОВНИМ ЛИГАНДИМА	22
M. M. Radanović, V. G. Bujić, Lj. S. Vojinović-Ješić, M. V. Rodić, V. M. Leovac, Ž. K. Jaćimović STRUCTURES OF Cd(II) COMPLEXES WITH 2-ACETYL PYRIDINE- AMINO GUANIDINE AND PSEUDOHALOGENIDE BRIDGING LIGANDS ...	23

Д. Ж. Вељковић, А. Ђуновић, Д. Кретић, С. Д. Зарић ДОКАЗ О ЈАКИМ МЕТАЛ-ВОДОНИК ИНТЕРАКЦИЈАМА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА КОМПЛЕКСА ПРЕЛАЗНИХ МЕТАЛА ...	24
D. Ž. Veljković, A. Đurđević, D. Kretić, S. D. Zarić EVIDENCE OF STRONG METAL-HYDROGEN INTERACTIONS IN CRYSTAL STRUCTURES OF TRANSITION METAL COMPLEXES	25
М. Р. Миловановић, Ј. М. Андрић, В. Б. Медаковић, Ј.-Р. Djukic, С. Д. Зарић ДА ЛИ СУ ФОСФИНО-БОРАНСКИ ПАРОВИ КЛАСИЧНИ ИЛИ ФРУСТРИРАНИ? АНАЛИЗА КЕМБРИЧКЕ КРИСТАЛОГРАФСКЕ БАЗЕ ПОДАТАКА.	26
M. R. Milovanović, J. M. Andrić, V. B. Medaković, J.-P. Djukic, S. D. Zarić ARE PHOSPHINE-BORANE PAIRS CLASSICAL OR FRUSTRATED? ANALYSIS OF CAMBRIDGE STRUCTURAL DATABASE.	27
Н. Јовић Орсини, М. М. Милић, Т. Е. Торес, Г. Ф. Гоја МИКРОСТРУКТУРНА АНАЛИЗА ЧИСТИХ И СУПСТИТУИСАНИХ НАНОЧЕСТИЦА МАГНЕТИТА СА ПОВОЉШАНОМ ЕФИКАСНОШЋУ ЗА МАГНЕТНУ ХИПЕРТЕРМИЈУ	28
N. Jović Orsini, M. M. Milić, T. E. Torres, G. F. Goya MICROSTRUCTURE ANALYSIS OF PURE AND SUBSTITUTED MAGNETITE NANOPARTICLES WITH IMPROVED MAGNETIC HYPERTHERMIA EFFICIENCY	29
И. М. Брадарић, В. М. Матић, И. Савић СИНТЕЗА, КРИСТАЛНА СТРУКТУРА И МАГНЕТНЕ ОСОБИНЕ $\text{CaRu}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ ($x=0; 0,03$)	30
I. M. Bradarić, V. M. Matić, Ilija Savić SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF $\text{CaRu}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ ($x=0; 0.03$).....	31
В. Н. Николић, М. М. Милић ЕВОЛУЦИЈА СТРУКТУРНИХ СВОЈСТАВА CuFe_2O_4 И $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ИНИЦИРАНА ТЕРМИЧКИМ ТРЕТМАНОМ	32
V. N. Nikolić, M. M. Milić EVOLUTION OF CuFe_2O_4 AND $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ STRUCTURAL PROPERTIES INITIATED BY THERMAL TREATMENT	33
М. Миловић, Д. Југовић, М. Митрић, Д. Ускоковић $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ КАО КАТОДНИ МАТЕРИЈАЛ ЗА ЛИТИЈУМ-ЈОНСКЕ БАТЕРИЈЕ: СИНТЕЗА, СТРУКТУРНЕ И ЕЛЕКТРОХЕМИЈСКЕ КАРАКТЕРИСТИКЕ	34

M. Milović , D. Jugović , M. Mitrić , D. Uskoković Li ₂ FeSiO ₄ AS CATHODE MATERIAL FOR LITHIUM-ION BATTERIES: SYNTHESIS, STRUCTURAL AND ELECTROCHEMICAL CHARACTERISTICS.....	35
---	----

N. Nikolić, S. Kovač, P. Dabić POJAVA OPALSKE MATERIJE U HIDROTERMALNO IZMENJENIM DIJABAZIMA, DEBELO BRDO, PLANINA POVLEN	36
--	----

N. Nikolić , S. Kovač , P. Dabić THE OCCURENCE OF OPALINE MATTER IN HYDROTHERMALLY ALTERED DIABASE, DEBELO BRDO, POVLEN MOUNTAIN AREA	37
--	----

Постерске презентације – Poster presentations

A. Cvetkovski, G. Petruševski, Lj. Pejov, M. Stojanovska, S. Ugarkovic, P. Makreski SOLID-STATE CHARACTERIZATION OF THE NEW MOLECULAR SALTS OF PYRIDOINE	41
---	----

Б. Чобељић, М. Миленковић, А. Певец, Д. Дармановић, И. Турел, К. Анђелковић СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА ИЗОТИОЦИЈАНОТО/ТИОЦИЈАНОТО КОМПЛЕКСА Cd(II) СА КОНДЕНЗАЦИОНИМ ПРОИЗВОДОМ 2-АЦЕТИЛПИРИДИНА И ЖИРАРОВОГ Т-РЕАГЕНСА	42
--	----

B. Čobeljić, M. Milenković, A. Pevec, D. Darmanović, I. Turel, K. Andđelković SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF ISOTHIOCYANATO/THIO- CYANATO Cd(II) COMPLEX WITH THE CONDENSATION PRODUCT OF 2-ACETYL PYRIDINE AND GIRARD'S T-REAGENT	43
---	----

Д. Радановић, А. Певец, И. Турел, Б. Чобељић, М. Миленковић, Т. Кешкић, К. Анђелковић СИНТЕЗА И КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ Co(III) КОМПЛЕКСА СА ХИДРАЗОНСКИМ И ТИОСЕМИКАРБАЗОНСКИМ ЛИГАНДИМА	44
--	----

D. Radanović, A. Pevec, I. Turel, B. Čobeljić, M. Milenković, T. Keškić, K. Andđelković SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURES OF Co(III) COMPLEXES WITH THE HYDRAZONE AND THIOSEMICARBAZONE LIGANDS	45
---	----

E. H. Avdović, V. V. Jevtić, M. P. Kasalović, D. Lj. Stojković, S. Jovičić N. Vuković, Z. Marković, I. Potočnák, S. R. Trifunović SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA 3-(1- <i>m</i> -TOLUIDIN-ETILIDEN)- HROMAN-2,4-DIONA	46
---	----

E. H. Avdović, V. V. Jevtić, M. P. Kasalović, D. Lj. Stojković, S. Jovičić, N. Vuković, Z. Marković, I. Potočnák, S. R. Trifunović SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF 3-(1- <i>m</i> -TOLUIDINO- ETHYLIDENE)-CHROMANE-2,4-DIONE	47
--	----

М. Ђукић, О. Клисурин, З. Матовић СИНТЕЗА, КАРАКТЕРИЗАЦИЈА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА[Ru(η^6 - <i>p</i> -cimen)Cl ₂ (5-PhAPyCN-ITZ)]	48
М. Ђукић, О. Klisurić, Z. Matović SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND CRYSTAL STRUCTURE OF COMPLEX [Ru(η^6 - <i>p</i> -cymene)Cl ₂ (5-PhAPyCN-ITZ)]	49
М. Вукић, Н. Вуковић, В. Тешевић, Г. Крстић, П. Вулић СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА ИНКЛУЗИОНОГ КОМПЛЕКСА АЦЕТИЛ ШИКОНИНА И β -ЦИКЛОДЕКСТРИНА	50
M. Vukić, N. Vuković, V. Tešević, G. Krstić, P. Vulić SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF INCLUSION COMPLEX OF ACETYL SHIKONIN AND β -CYCLODEXTRIN	51
O. R. Klisurić, S. Armaković, S. J. Armaković, S. Lj. Vrbaški, I. Kuzminac, D. S. Jakimov, S. S. Jovanović Šanta RENDGENSKA STRUKTURNA ANALIZA I KOMPJUTERSKA STUDIJA БИОЛОШКИ АКТИВНИХ DERIVATA ANDROST-5-ENA	52
O. R. Klisurić, S. Armaković, S. J. Armaković, S. Lj. Vrbaški, I. Kuzminac, D. S. Jakimov, S. S. Jovanović Šanta X-RAY CRYSTALLOGRAPHIC AND COMPUTATIONAL STUDY OF BIOLOGICALY ACTIVE ANDROST-5-ENE DERIVATIVES	53
Z. D. Tomić, M. Mirković КООРДИНАЦИОНИ ПОЛИМЕР КОЈИ САДРЖИ ТЕТРАНУКЛЕАРНЕ КОМПЛЕКСЕ БАКРА СА ОКСИМАТНИМ МОСТОВИМА	54
Z. D. Tomić, M. Mirković COORDINATION POLYMER CONTAINING TETRANUCLEAR COPPER COMPLEXES WITH OXIMATO BRIDGES	55
T. R. Todorović, G. Janjić, P. Ristić, M. V. Rodić, N. R. Filipović МОЛЕКУЛСКА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА Pd(II) I Pt(II) SA TIOMORFOLIN-4-KARBONITRILOM	56
T. R. Todorović, G. Janjić, P. Ristić, M. V. Rodić, N. R. Filipović MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF Pd(II) AND Pt(II) COMPLEXES WITH THIOMORPHOLINE-4-CARBONITRILE	57
M. V. Rodić, S. Belošević, M. M. Radanović, V. M. Leovac СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА [{Cu(μ -H ₂ L)(NCS)} ₂](NCS) ₂ ·2MeOH (H ₂ L = <i>S</i> -МЕТИЛИЗОТИОСЕМИКАРБАЗОН ПИРИДОКСАЛА)	58
M. V. Rodić, S. Belošević, M. M. Radanović, V. M. Leovac SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF [{Cu(μ -H ₂ L)(NCS)} ₂](NCS) ₂ ·2MeOH (H ₂ L = PYRIDOXAL <i>S</i> -METHYLISOTHOSEMICARBAZONE)	59

I. R. Marjanović, O. R. Klisurić, S. Armaković, S. J. Armaković, N. R. Filipović, T. R. Todorović	
JEDNODIMENZIONALNI TERNARNI SREBRO(I)-5-SULFOSALICILAT KOORDINACIONI POLIMER	60
I. R. Marjanović, O. R. Klisurić, S. Armaković, S. J. Armaković, N. R. Filipović, T. R. Todorović	
ONE-DIMENSIONAL SILVER(I)-5-SULFOSALICYLATE TERNARY COORDINATION POLYMER	61
N. R. Filipović, O. R. Klisurić, G. V. Janjić , T. R. Todorović	
KRISTALNE STRUKTURE KOORDINACIONIH POLIMERA Ag(I) SA 2-TIOCIJANATOPIRIDINOM	62
N. R. Filipović, O. R. Klisurić, G. V. Janjić, T. R. Todorović	
CRYSTAL STRUCTURES OF Ag(I) COORDINATION POLYMERS WITH 2-THIOCYANATOPYRIDINE	63
A. Rakić, Lj. Suručić, Z. Sandić, B. Ekmešić, A. Nastasović, G. Janjić	
КРИСТАЛОГРАФСКА И КВАНТНО-ХЕМИЈСКА СТУДИЈА АПСОРПЦИЈЕ МЕТАЛА НА КОПОЛИМЕРУ МОДИФИКОВАНОМ ТРИЕТИЛЕНТЕТРААМИНОМ (TETA)	64
A. Rakić, Lj. Suručić, Z. Sandić, B. Ekmešić, A. Nastasović, G. Janjić	
CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF METAL SORPTION ON COPOLYMER FUNCTIONALIZED WITH TRIETHYLENETETRAAMINE (TETA)	65
И. Антонијевић, Д. Ж. Вељковић, Г. Сарић, К. Катанчевић, С. Д. Зарић	
КРИСТАЛОГРАФСКО И КВАНТНОХЕМИЈСКО ПРОУЧАВАЊЕ ИНТЕРАКЦИЈА СУМПОРА И ДИСУЛФИДНЕ ВЕЗЕ	66
I. S. Antonijević, D. Ž. Veljković, G. Sarić, K. Katančević, S. D. Zarić	
CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF INTERACTIONS BETWEEN SULFUR AND DISULFIDE BOND	67
И. М. Станковић, Ј. П. Благојевић Филиповић, С. Д. Зарић	
ИНТЕРАКЦИЈЕ ИЗМЕЂУ УГЉЕНИХ ХИДРАТА И АРОМАТИЧНИХ АМИНОКИСЕЛИНА: КРИСТАЛОГРАФСКА ПРЕТРАГА	68
I. M. Stanković, J. P. Blagojević Filipović, S. D. Zarić	
INTERACTIONS BETWEEN CARBOHYDRATES AND AROMATIC AMINO ACIDS: A CRYSTALLOGRAPHIC SURVEY	69
M. Sarvan, M. Petković Benazzouz, A. Rakić, G. Janjić	
AKCEPTORSKE OSOBINE KOORDINOVANOG O ATOMA. KRISTALOGRAFSKO I KVANTNO-HEMIJSKO STUDIJA	70
M. Sarvan, M. Petković Benazzouz, A. Rakić, G. Janjić	
ACCEPTOR ABILITY OF COORDINATED OXYGEN ATOM. CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL STUDY	71

Ј. П. Благојевић Филиповић, С. Д. Зарин СТЕКИНГ ИНТЕРАКЦИЈЕ ПРСТЕНОВА ФОРМИРАНИХ ВОДОНИЧНИМ ВЕЗИВАЊЕМ ПОТПОМОГНУТИМ РЕЗОНАНЦИЈОМ	72
J. P. Blagojević Filipović, S. D. Zarić STACKING INTERACTIONS OF RESONANCE-ASSISTED HYDROGEN- -BRIDGED RINGS	73
М. Петковић Benazzouz, Ј. Ђорђевић, Г. Јанчић STATISTIČKA ANALIZA NEKOVALENTNIH INTERAKCIJA SELENA U KRISTALNIM STRUKTURAMA MALIH MOLEKULA	74
M. Petković Benazzouz, Ј. Ђорђевић, Г. Јанчић STATISTICAL ANALYSIS OF NON-COVALENT INTERACTIONS OF SELENIUM IN CRYSTAL STRUCTURES OF SMALL MOLECULES	75
И. С. Антонијевић, Д. П. Маленов, С. Д. Зарин ЈАКЕ СТЕКИНГ ИНТЕРАКЦИЈЕ ИЗМЕЂУ ТЕТРАТИЈАФУЛВАЛЕНСКИХ ФРАГМЕНТА: КРИСТАЛОГРАФСКА И КВАНТНОХЕМИЈСКА СТУДИЈА	76
I. S. Antonijević, D. P. Malenov, S. D. Zarić STRONG STACKING INTERACTIONS BETWEEN TETRATHIAFULVALENE FRAGMENTS: CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM CHEMICAL STUDY	77
Ј. Ј. Плавша, Р. Реџачова, Ј. Бријнда, А. Ђелић, Е. Т. Петри, Ј. Шкерлов УТИЦАЈ МОДИФИКОВАНЕ <i>IN SITU</i> ПРОТЕОЛИЗЕ НА КВАЛИТЕТ ДИФРАКЦИЈЕ КРИСТАЛА ПРОТЕИНА AKR1C3	78
J. J. Plavša, P. Režačova, J. Brynda, A. Čelić, E. T. Petri, J. Škerlova EFFECT OF MODIFIED <i>IN SITU</i> PROTEOLYSIS ON DIFFRACTION QUALITY OF PROTEIN AKR1C3 CRYSTALS	79
Н. Бошњаковић-Павловић, С. Новаковић, Б. Clair, А. Икни, В. Ли, Р. Гемеинер, А. Спашојевић - де Бире НЕФОТОХЕМИЈСКИ ЛАЗЕРОМ ИНДУКОВАНА НУКЛЕАЦИЈА ГЛИЦИНА.....	80
N. Bošnjaković-Pavlović, S. Novaković, B. Clair, A. Ikni, W. Li, P. Gemeiner, A. Spasojevic - de Biré NON-PHOTOCHEMICAL LASER-INDUCED NUCLEATION OF GLYCINE	81
A. José F. M. L. Mariano, B. Antić DEVELOPMENT OF A ZERO-FIELD NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE SPECTROMETER FOR THE STUDY OF FERROMAGNETIC MATERIALS ...	83
М. М. Милић, В. Н. Николић, Н. Ђ. Лазаров ТЕРМИЧКИ ИЗАЗВАНЕ СТРУКТУРНЕ ТРАНСФОРМАЦИЈЕ Fe_2O_3 НАНОЧЕСТИЦА У SiO_2 МАТРИЦИ	84

M. M. Milić, V. N. Nikolić, N. Dj. Lazarov	
THERMALLY INDUCED STRUCTURAL TRANSFORMATIONS OF Fe_2O_3 NANOPARTICLES EMBEDDED IN A SILICA MATRIX	85
L. Radovanović, P. Vulić, Z. Jagličić, Ž. Radovanović, I. Zeković, J. Rogan	
SINTEZA, STRUKTURA I SVOJSTVA DVOFAZNOG Mn(II)/Zn(II) MATERIJALA	86
L. Radovanović, P. Vulić, Z. Jagličić, Ž. Radovanović, I. Zeković, J. Rogan	
SYNTHESIS, STRUCTURE AND PROPERTIES OF Mn(II)/Zn(II) BIPHASIC MATERIAL	87
M. Ognjanović, D. Stanković, M. Mirković, M. Radović, T. Stanojković, B. Antić	
MAGNETIT CVETNE MORFOLOGIJE SINTETISAN POLIOL METODOM ZA POTENCIJALNE PRIMENE U MEDICINI	88
M. Ognjanović, D. Stanković, M. Mirković, M. Radović, T. Stanojković, B. Antić	
MAGNETITE NANOFLOWERS SYNTHESIZED BY A POLYOL-MEDIATED PROCESS FOR APPLICATION IN MEDICINE	89
J. Bijelić, C. Li, B. Smarsly, H. Over, I. Djerdj	
KONTROLISANA SINTEZA RAZLIČITIH OBLIKA CeO_2 NANOČESTICA: EFEKT RAZLIČITIH PREKURSORA NA NASTAJANJE UPRAŽNJENIH MESTA ZA KISEONIK	90
J. Bijelić, C. Li, B. Smarsly, H. Over, I. Djerdj	
SHAPE-CONTROLLED SYNTHESIS OF CeO_2 NANOPARTICLES: EFFECTS OF DIFFERENT PRECURSORS ON THE FORMATION OF OXYGEN VACANCIES	91
B. Simović, A. Dapčević, J. Zdravković, G. Branković	
FAZNI PRELAZ NANOSTRUKTURNOG TITAN-DIOKSIDA U SLOJEVITI TITANAT	92
B. Simović, A. Dapčević, J. Zdravković, G. Branković	
PHASE TRANSITION FROM NANOSTRUCTURED TITANIA TO LAYERED TITANATE	93
G. Janjić, D. Milojkov, D. Mutavdžić, V. Živković-Radovanović, K. Radotić, A. Radosavljević-Mihajlović, V. Stanić	
Ag-DOPIRANI FLUORAPATITNI NANOMATERIJALI DOBIJENI POSTUPKOM NEUTRALIZACIJE	94
G. Janjić, D. Milojkov, D. Mutavdžić, V. Živković-Radovanović, K. Radotić, A. Radosavljević-Mihajlović, V. Stanić	
Ag-DOPED FLUORAPATITE NANOMATERIALS OBTAINED BY NEUTRALIZATION METHOD	95

В. Н. Николић, М. М. Милић CuFe ₂ O ₄ НАНОЧЕСТИЦЕ: ВИСОКО-ТЕМПЕРАТУРСКА ТЕТРАГОНАЛНА И КУБНА ФАЗА	96
V. N. Nikolić, M. M. Milić CuFe ₂ O ₄ NANOPARTICLES: HIGH-TEMPERATURE TETRAGONAL AND CUBIC PHASE	97
П. Дабић, С. Ковач, М. Г. Николић, А. Кременовић ФОТОЛУМИНЕСЦЕНЦИЈА, СТРУКТУРА И ПОЛИМОРФИЗАМ K ₃ ErSi ₂ O ₇	98
P. Dabić, S. Kovač, M. G. Nikolić, A. Kremenović PHOTOLUMINESCENCE, STRUCTURE AND POLYMORPHISM OF K ₃ ErSi ₂ O ₇	99
П. Дабић, V. Kahlenberg, С. Ковач, J. Блануша, Љ. Карановић, А. Кременовић КРИСТАЛНА СТРУКТУРА β-K ₃ YbSi ₂ O ₇ НА 298 И 100 К	100
P. Dabić, V. Kahlenberg, S. Kovač, J. Blanuša, Lj. Karanović, A. Kremenović CRYSTAL STRUCTURE OF β-K ₃ YbSi ₂ O ₇ AT 298 AND 100 K	101
М. Цветинов, М. Стојановић ФАЗНА АНАЛИЗА ОТПАДНИХ МУЉНИХ ПОГАЧА ИЗ ПРОЦЕСА БРУШЕЊА И ПОЛИРАЊА СТАКЛА	102
M. Cvetinov, M. Stojanović PHASE ANALYSIS OF WASTE SLURRIES OBTAINED AFTER GLASS GRINDING AND POLISHING PROCESS	103
Н. Даниловић, Љ. Кузмановић, М. Милошевић, А. Јанићијевић, М. Браловић КРИСТАЛИЗАЦИОНИ МОСТ	104
N. Danilović, LJ. Kuzmanović, M. Milošević, A. Janićijević, M. Bralović CRYSTALLIZATION BRIDGE	105

ACCEPTOR ABILITY OF COORDINATED OXYGEN ATOM. CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL STUDY

M. Sarvan,^a M. Petković Benazzouz,^a A. Rakić,^b G. Janjić^c

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

^b Faculty of Physical Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;

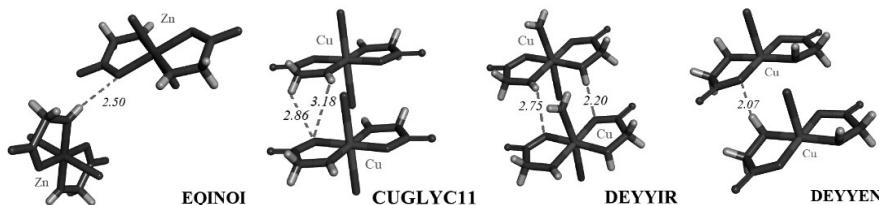
^c Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy Belgrade, University of Belgrade, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia.

e-mail: miras@ff.bg.ac.rs

Previous research has indicated that affinity of metal complexes toward hydrogen bonding is strongly dependent both from its charging and nature of metal ion and ligands [1].

The results also emphasize stronger ligand donating abilities for hydrogen bonding along with coordination to metal ion [2].

Acceptor abilities of carboxyl group of hydroxyacetates (glycolate) for hydrogen bonding after coordination were investigated based on crystal structures data and quantum-chemical calculations. Cambridge Structural Database was used to obtain valuable crystallographic data. All crystal structures in which coordinated carboxylic oxygen atom acts like acceptor in hydrogen bond are analysed. The analysed complexes are neutral and metal ion has +2 charge in majority of them (~70%). Bond distances in those systems are shorter than 3.0 Å while the values of bond angles indicate that oxygen atom prefers to simultaneously interacts with surrounding chemical species. Visual analysis has pointed out to strong dependence of hydrogen bonding geometry from metal atom and geometry of complex.



Structures where OH group from glycolate ligand participate in hydrogen bonding are numerous. They have shorter bond lengths and noticeable tendency for linear bonding.

Quantum chemical calculations on glycolate complex systems have shown how complex charging, metal ion charging and nature of ligand influence on strength of hydrogen bonding.

[1] G. V. Janjić, M. D. Milosavljević, D. Ž. Veljković, S. D. Zarić, Phys. Chem. Chem. Phys., **19** (2017), 8657-8660.

[2] J. M. Andrić, G. V. Janjić, D. B. Ninković, S. D. Zarić, Phys. Chem. Chem. Phys., **14** (2012), 10896-10898.