

Srpsko hemijsko društvo



Serbian Chemical Society

**59. Savetovanje
Srpskog hemijskog društva**

**KRATKI IZVODI
RADOVA
KNJIGA RADOVA**

**59th Meeting of
the Serbian Chemical Society**

**Book of Abstracts
Proceedings**

**Novi Sad 1. i 2. jun 2023. godine
Novi Sad, Serbia, June 1-2, 2023**

CIP- Katalogizacija u publikaciji
Narodna biblioteka Srbije, Beograd

59. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA,
Novi Sad, 1. i 2. jun 2023.

KRATKI IZVODI RADOVA/KNJIGA RADOVA
59th MEETING OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY
Novi Sad, Serbia, 1-2 June 2023
BOOK OF ABSTRACTS/PROCEEDINGS

Izdaje/Published by

Srpsko hemijsko društvo/Serbian Chemical Society
Karnegijeva 4/III, 11000 Beograd, Srbija

tel./fax: +381 11 3370 467; www.shd.org.rs, E-mail: office@shd.org.rs

Za izdavača/For Publisher

Dušan Sladić, predsednik Srpskog hemijskog društva

Glavni i odgovorni urednik/ Editor

Daniela Šojić Merkulov

Uređivački odbor/Editorial Board

Suzana Jovanović-Šanta, Stanislava Olić Ninković, Ksenija Pavlović, Aleksandar Oklješa

Priprema za štampu i štampa/Prepress and printing

Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva Tehnološko-metalurškog

fakulteta, Beograd / Research and Development Centre of Printing Engineering, Belgrade

Tiraž/ Circulation

30 primeraka/ 30 copies printing

ISBN 978-86-7132-081-8

Naučni odbor

Scientific Committee

Daniela Šojić Merkulov,
predsednik/chair

Dušan Sladić

Vesna Mišković Stanković

Olgica Nedić

Dragica Trivić

Sladana Alagić

Snežana Rajković

Aleksandar Bojić

Dušanka Milojković Opsenica

Dejan Opsenica

Maja Radetić

Branka Petković

Ljiljana Vojinović Ješić

Igor Opsenica

Milan Vraneš

Biljana Šmit

Sanja Panić

Jovana Francuz

Ivan Ristić

Milena Krstić

Vesna Despotović

Dragana Tomašević Pilipović

Marija Nikolić

Branislav Šojić

Tamara Premović



Organizacioni odbor

Organising Committee

Suzana Jovanović-Šanta,
predsednik/chair

Srđan Miletić

Zorica Stojanović

Bojana Srećo Zelenović

Ksenija Pavlović

Aleksandar Oklješa

Mirjana Radanović

Tamara Ivetić

Stanislava Olić Ninković

Danica Jović

Mirjana Petronijević

Ružica Ždero Pavlović

Sofija Bekić

Snežana Papović

Jelena Bajac

Ana Đurović

Tatjana Jurić

Tatjana Majkić

Jelena Tanasić

Tijana Marjanović

Marija Kostić



Savetovanje je podržalo /Supported by

Ministarstvo nauke, tehnološkog razvoja i inovacija Republike Srbije

Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia

Ova knjiga sadrži kratke izvode
četiri plenarna predavanja (PP),
dva predavanja dobitnika Medalje SHD (MP),
tri predavanja po pozivu (PPP),
devedeset šest saopštenja (obima jedne stranice) i
pet radova (obima od najmanje četiri stranice),
prihvaćenih za prezentovanje na
59. Savetovanju Srpskog hemijskog društva.

This book contains abstracts of
four plenary lectures (PP),
two lectures of SCS Medal awardees (MP),
three invited lectures (PPP),
ninety-six abstracts and
five papers accepted for presentation at
the 59th Meeting of the Serbian Chemical Society.

*Informacije i stavovi izneti u ovoj publikaciji su provizorni. Srpsko hemijsko društvo, urednik i uređivački odbor nisu odgovorni za interpretacije, eventualne posledice i štamparske greške.
The information and the opinions given in this publication are provisional. Serbian Chemical Society, Editor or Editorial Board are not responsible for any interpretations, their consequences or typographical errors.*

Teorijska hemija

Theoretical Chemistry



Neočekivani Ni(III) kompleks sa hidrazonskim ligandom – analiza spinskih stanja

Miloš K. Milčić¹, Maja A. Gruden¹, Matija S. Zlatař²

¹ Univerzitet u Beogradu – Hemijski fakultet, Studentski trg 12 – 16, Beograd, Srbija

² Univerzitet u Beogradu – Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Njegoševa 12, 11000 Beograd, Srbija

Tokom sinteze kompleksa nikla(II) sa tridentatnim I–1-(2-okso-2-(2-(1-(piridin-2-il)etiliden)hidrazinil)etil)piridin-1-ijum ligandom (**L**) došlo je do neočekivane oksidacije Ni(II) u Ni(III), vazdušnim kiseonikom, pri veoma blagim uslovima. Nastali oktaedarski [NiL(N₃)₃] kompleks pokazuje veoma zanimljive spinske i magnetne osobine, koje su proučavane metodama teorije funkcionala gustine (DFT). Proračuni su pokazali da će u vodenom rastvoru, dubletno spinsko stanje biti osnovno stanje ovog kompleksa, dok je energija kvartetnog spinskog stanja za 16,55 kcal/mol visa. U osnovnom stanju, spinska gustina nesporenog elektrona je locirana najvećim delom na jonu Ni(III) (76,5%), i atomima azota (10,7%) i kiseonika (7,5%) iz prve koordinacione sfere kompleksa.

Unexpected Ni(III) complex with hydrazone ligand – spin state analysis

Miloš K. Milčić¹, Maja A. Gruden¹, Matija S. Zlatař²

¹ University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia

² University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia

During synthesis of Ni(II) complex with (E)–1-(2-oxo-2-(2-(1-(pyridin-2-yl)ethylidene)hydrazinyl)ethyl)pyridin-1-ium ligand (**L**) unexpected oxidation of Ni(II) to Ni(III) with atmospheric oxygen occurred at mild conditions. Unusual spin and magnetic properties of the synthesized octahedral [NiL(N₃)₃] complex, were further investigated with Density Functional Theory (DFT) methods. These DFT calculations have shown that, in water solution, doublet state is the ground state for Ni(III) complex, with the quartet state higher in energy for 16.55 kcal/mol. Spin density calculations have revealed that most of the spin density is located on Ni(III) ion (76.5%), and N (10.7%) and O (7.5%) atoms from the first coordination sphere of the complex.

Acknowledgment: This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, #7750288, Tailoring Molecular Magnets and Catalysts Based on Transition Metal Complexes – TMMagCat.