

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**IX КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**
Изводи радова

**IX CONFERENCE
OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**
Abstracts

БЕОГРАД – BELGRADE
2001

ISSN 0354-5741

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

IX КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА
Изводи радова

IX CONFERENCE
OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Abstracts

БЕОГРАД – BELGRADE
2001

IX KONFERENCIJA SRPSKOG KRISTALOGRAFSKOG DRUŠTVA
Изводи радова

IX CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Abstracts

Издавач - Publisher

- Српско Кристалографско Друштво,

Ђушина 7, 11000 Београд, Југославија, тел./факс: 635 – 217

- Serbian Crystallographic Society

Đušina 7, 11000 Beograd, Yugoslavia, phone/fax: 381 – 11 – 635 – 217

За издавача – For the publisher

Љиљана Карановић – Ljiljana Karanović

Технички уредник – Technical editor:

Агнеш Капор – Agneš Kapor

Оливера Марковић – Olivera Marković

Издавање ове публикације омогућено је финансијском помоћи Интернационалне
уније за кристалографију

This publication is financially supported by International Union of Crystallography

© Српско Кристалографско Друштво – Serbian Crystallographic Society

ISSN 0354-5741

Штампа – Printing:

“LINK”

Novi Sad, Futoška 38

“LINK”

Novi Sad, Futoška 38

Тираж – Copies: 100

Нови Сад – Novi Sad

2001

**IX КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА
Нови Сад, 20. – 22. 9. 2001**

**IX CONFERENCE
OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Novi Sad, 20. – 22. 9. 2001**

НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:

- S. Stanković, PMF, Novi Sad
- A. Kapor, PMF, Novi Sad
- V. Leovac, PMF, Novi Sad

ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZING COMMITTEE:

- S. Stanković, PMF, Novi Sad
- D. Lazar, PMF, Novi Sad
- O. Marković, PMF, Novi Sad

CONTENTS – САДРЖАЈ

PLENARY LECTURES – ПЛЕНАРНА ПРЕДАВАЊА

<u>S. Stanković</u> CRYSTALLOGRAPHY AND STRUCTURAL BIOLOGY: STRUCTURE – ACTIVITY RELATIONSHIP	2
<u>S. Stanković</u> KRISTALOGRAFIJA U STRUKTURNOJ BIOLOGIJI: VEZA IZMEĐU STRUKTURE I AKTIVNOSTI	6
<u>S. Zarić</u> STADY OF NONCOVALENT INTERACTIONS BY SEARCHING CRYSTAL STRUCTURES IN DATA BANKS	10
<u>S. Zarić</u> PROUČAVANJE NEKOVALENTNIH INTERAKCIJA PRETRAŽIVANJEM KRISTALNIH STRUKTURA U BANKAMA PODATAKA	11

ORAL PRESENTATIONS – САОПШТЕЊА

<u>D. Lazar, S. Stanoković, O. Marković, E. Đurendić, M. Sakač, T. Pilati</u> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF 3 β -HYDROXY-17-PICOLINYLIDENE-5 α - ANDROSTANE	14
<u>D. Lazar, S. Stanoković, O. Marković, E. Đurendić, M. Sakač, T. Pilati</u> SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA 3 β -HIDROKSI-17-PIKOLINILIDEN-5 α -ANDROSTANA ...	15
<u>O. Marković, S. Stanković, D. Lazar, Ch. Courseille, E. Đurendić, Lj. Medić-Mijačević</u> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE INVESTIGATIONS OF TWO ANDROSTENE DERIVATIVES	16
<u>O. Marković, S. Stanković, D. Lazar, Ch. Courseille, E. Đurendić, Lj. Medić-Mijačević</u> SINTEZA, STRUKTURNA I KRISTALOGRAFSKA ISTRAŽIVANJA DVA DERIVATA ANDROSTENA	17
<u>S. Novaković, G. A. Bogdanović, V. Đinović, T. J. Sabo</u> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF S-CIS-(ETHYLENDIAMINE-N, N'-DIACETATO) (N, N-DIMETHYLGLYCINATO)COBALT(III).....	18
<u>S. Novaković, G. A. Bogdanović, V. Đinović, T. J. Sabo</u> SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA S-CIS-(ETILENDIAMIN-N, N'-DIACETATO) (N, N- DIMETILGLICINATO)KOBALTA(III)	19
<u>G. A. Bogdanović, V. Đinović, T. J. Sabo, A. Spasojević – de Brić</u> CRYSTAL STRUCTURE OF TRANS-DIBROMO(1,3-PROPYLENEDIAMINE-N,N'-DIACETATO) PLATINUM(IV)MONOHIDRATE.....	20

G. A. Bogdanović, V. Đinović, T. J. Sabo, A. Spasojević – de Brié KRISTALNA STRUKTURA TRANS-DIBROMO(1,3-PROPILENDIAMIN-N,N'-DIACETATO) DIBROMOPLATINA(IV)-MONOHIDRATA.....	21
A. Spasojević – de Brié, A. Kremenović, N.-E. Ghermani, P. Hubberstey CRYSTAL STRUCTURE OF A COPPER(I) CYANO GUANIDINE COMPLEX.....	22
A. Spasojević – de Brié, A. Kremenović, N.-E. Ghermani, P. Hubberstey KRISTALNA STRUKTURA JEDNOG BAKAR(I) KOMPLEKSA CIJANO GVANIDINA.....	23
A. Kapor, D. Zobel, M. Strümpel, Lj. Torović, M. Popsavin CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF E-FORM OF UNSATURATED ESTERS OF C-NUCLEOSIDES.....	24
A. Kapor, D. Zobel, M. Strümpel, Lj. Torović, M. Popsavin KRISTALNA I MOLEKULSKA STRUKTURA E-FORME NEZASIĆENOG ESTRA C-NUKLEOZIDA.....	25
A. A. Žekić, M. M. Mitrović IMPROVEMENT OF INITIAL CRYSTAL GROWTH CONDITIONS BY DISSOLUTION AND REFACETING.....	26
A. A. Žekić, M. M. Mitrović UJEDNAČAVANJE POČETNIH USLOVA RASTA KRISTALA RASTVARANJEM I REFACETIRANJEM.....	27
Z. D. Tomić, G. A. Bogdanović, Ž. Jaćimović, V. Leovac CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF THE DICHLORO-TRIS(3-AMINO-5- PHENILPIRAZOLE)ZINC(II) COMPLEX.....	28
Z. D. Tomić, G. A. Bogdanović, Ž. Jaćimović, V. Leovac KRISTALNA I MOLEKULSKA STRUKTURA DIHLORO-TRIS(3-AMINO-5- FENILPIRAZOL)CINK(II).....	29
G. A. Bogdanović, V. S. Jevtović, V. M. Leovac, A. Spasojević-de Biré CRYSTAL STRUCTURE OF AQUA(PYRIDOXALTHIOSEMICARBAZONATO) COPPER(II)BROMIDE, [Cu(L-H)H ₂ O]B.....	30
G. A. Bogdanović, V. S. Jevtović, V. M. Leovac, A. Spasojević-de Biré KRISTALNA STRUKTURA AKVA(PIRIDOKSALTIOSEMIKARBAZONATO) BAKAR(II)BROMIDA, [Cu(L-H)H ₂ O]B.....	31
P. Tančić, V. Janežić ALUNITE AND NATROALUNITE FROM VELIKI BUKOVIK.....	32
P. Tančić, V. Janežić ALUNIT I NATROALUNIT SA VELIKOG BUKOVIKA.....	33
P. Tančić, R. Dimitrijević, V. Janežić ARSENOPYRITES FROM SOME ORE DEPOSITS OF SERBIA.....	34

P. Tančić, R. Dimitrijević, V. Janežić ARSENOPIRITI IZ NEKIH RUDNIH LEŽIŠTA SRBIJE	35
B. Antić, N. Jović, M. Mitrić, A. Kremenović, A. Spasojević – de Brić, D. Rodić REFINEMENT OF THE CRYSTAL STRUCTURE OF $\text{Li}_{1.33-0.665x}\text{Co}_x\text{Ti}_{1.67-0.335x}\text{O}_4$ IN TWO SPACE GROUPS AT TWO WAVELENGTHS.....	36
B. Antić, N. Jović, M. Mitrić, A. Kremenović, A. Spasojević – de Brić, D. Rodić UTAČNJAVANJE KRISTALNE STRUKTURE $\text{Li}_{1.33-0.665x}\text{Co}_x\text{Ti}_{1.67-0.335x}\text{O}_4$ U DVE PROSTORNE GRUPE SA DVE TALASNE DUŽINE	37
D. Rodić, J. Blanuša, M. Mitrović, B. Antić CRYSTAL AND MAGNETIC STRUCTURE OF $\text{Fe}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ SOLID SOLUTIONS	38
D. Rodić, J. Blanuša, M. Mitrović, B. Antić KRISTALNA I MAGNETNA STRUKTURA ČVRSTIH RASTVORA $\text{Fe}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$	39
Á. Bordás, A. Kapor PAIR DISTRIBUTION FUNCTION AND THE LOCAL STRUCTURE OF DISORDERED MATERIALS.....	40
Á. Bordás, A. Kapor FUNKCIJA RASPODELE PAROVA I LOKALNA STRUKTURA NEUREĐENIH MATERIJALA	41
A. Janićijević, B. Čabrić CRUCIBLE FURNACE FOR OBTAINING CRYSTALS.....	42
A. Јанићијевић, Б. Чабрић ТИГЛ ПЕЋ ЗА ДОБИЈАЊЕ КРИСТАЛА	43
B. Čabrić, A. Janićijević A CHAMBER FURNACE FOR OBTAINING CRYSTALS	44
B. Чабрић, А. Јанићијевић КОМОРНА ПЕЋ ЗА ДОБИЈАЊЕ КРИСТАЛА	45
D. Poletić, Lj. Karanović, J. Rogan A NEW POLYMERIC COBALT(II) COMPLEX CONTAINING TEREPHTHALATE IONS AND 1,10- PHENANTHROLINE	46
D. Poletić, Lj. Karanović, J. Rogan NOVI POLIMERNI KOBALT(II) KOMPLEKS SA TEREFTALAT-JONIMA I 1,10- FENANTROLINOM.....	47
A. Rosić, I. Petrović-Prelević, D. Jovanović X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS IN THE VEGETABLE FAT POLYMORPHISM STUDY – STARTING COMPONENTS	48
A. Rosić, I. Petrović-Prelević, D. Jovanović ISPITIVANJE POLIMORFIZMA BILJNIH MASTI RENDGENSKOM DIFRAKCIJOM – POLAZNE KOMPONENTE	49

<u>A. Kapor</u> , M. Vučinić, S. Rakić, V. Nikolić STRUCTURAL CHARACTERISATION OF THE ALICINE COMPLEX WITH β -CYCLODEXTRINE AND UREA	50
<u>A. Kapor</u> , M. Vučinić, S. Rakić, V. Nikolić STRUKTURNA KARAKTERIZACIJA KOMPLEKSA ALICINA SA β -CIKLODEKSTRINOM I UREOM	51
<u>O. Marković</u> , D. Lazar, S. Stanković, M. Sakač, O. Arcson, T. Pilati SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF 4-SOLANIDENE-3-ONE	52
<u>O. Marković</u> , D. Lazar, S. Stanković, M. Sakač, O. Arcson, T. Pilati SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA 4-SOLANIDEN-3-ONA	53
<u>S. Stanković</u> , D. Lazar, O. Marković, K. Penov-Gaši, M. Sakač, T. Pilati SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE INVESTIGATIONS OF TWO ANDROSTANE DERIVATIVES	54
<u>S. Stanković</u> , D. Lazar, O. Marković, K. Penov-Gaši, M. Sakač, T. Pilati SINTEZA, KRISTALOGRAFSKA I STRUKTURNA ISTRAŽIVANJA DVA DERIVATA ANDROSTANA	55
IN MEMORIAM: Др ДУБРАВКО РОДИЋ	57
IN MEMORIAM: DR DUBRAVKO RODIĆ	59

ALUNITE AND NATROALUNITE FROM VELIKI BUKOVIK

P. Tančić^a, V. Janežić^a^aGeoinstitute, Rovinjska 12, Belgrade, Yugoslavia

e-mail: geoins@EUnet.yu

With the X-ray qualitative, semiquantitative powder diffraction analysis it was determined that in investigated sample from Veliki Bukovik there are following mineral species according to their quantity: alunite ($\approx 47\%$), natroalunite ($\approx 47\%$), and insignificant jarosite ($\approx 4\%$), quartz ($\approx 1,5\%$) and feldspars ($\approx 0,5\%$). Throughout LSUCRIPC [1] it were calculated in the space group $R\bar{3}m$ unit cell dimensions of alunite, natroalunite and jarosite (Table 1). The chemical analysis first was recalculated into oxides theoretically may come into the composition of alunite mineral group, and then was the crystallochemical formula calculated at 28 O basis. These results are represented at the Table 2. From the literature [2], [3], [4] and [5], a_0 -axis changes with Al^{3+} - Fe^{3+} contents, while c_0 -axis changes with Na^+ - K^+ contents. From the diagram dependence a_0 and c_0 -axis from relative at.% K and Na [3], it can be seen following: 1. investigated alunite at c_0 -axis belongs to the type with 82%K : 18%Na; and 2. investigated natroalunite at c_0 -axis belongs to the type with 62%Na : 38%K. From crystallochemical formulas of alunite and natroalunite (Table 3) it can be seen that some of the alkalies are replaced with hydronium ion. In consideration of this and to datas [2], [3], [4], [6], and [7], our opinion is that investigated alunite and natroalunite (and jarosite) from Veliki Bukovik are most probably diagenetic or low-temperature origin in acid conditions with high sulphate activity.

Table 1: Calculated unit cell dimensions of alunite, natroalunite and jarosite.

	$a_0(\text{Å})$	$c_0(\text{Å})$	$V_0(\text{Å}^3)$	c_0/a_0
alunite	6.976(1)	17.295(6)	729.0(3)	2.479
natroalunite	6.981(1)	16.884(6)	712.6(3)	2.419
jarosite	7.291(4)	17.23(2)	793(1)	2.363

Table 2: Recalculated chemical analysis (in %) and number of atoms on 28 O basis.

	K ₂ O	Na ₂ O	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	SO ₃	H ₂ O
calculated chemical analysis	7.00	1.91	37.27	1.27	38.96	13.60
number of atoms on 28 O basis	1.21 K	0.50 Na	5.95 Al	0.13 Fe	3.96 S	12.29 H

Table 3: Calculated crystallochemical formulas of alunite and natroalunite.

	crystallochemical formula
alunite	$(K_{0.83}(H_3O)_{0.17})_{1.00}Al_{3.00}(S_{0.99}O_4)_2(OH)_6$
natroalunite	$(Na_{0.50}K_{0.38}(H_3O)_{0.12})_{1.00}(Al_{2.95}Fe_{0.13})_{3.08}(S_{0.99}O_4)_2(OH)_6$

[1] R. Garvey, Least-square unit cell refinement, Version 86,2, Dept. of Chemistry, North Dakota State University (1987).

[2] G. P. Brophy, E. S. Scott & R. A. Snellgrove, Am. Min., 47 (1962), p. 112-126.

[3] R. L. Parker, Am. Min., 47 (1962), p. 127-136.

[4] G. P. Brophy & M. F. Sheridan, Am. Min., 50 (1965), p. 1595-1607.

[5] S. Menchetti & C. Sabelli, N. Jb. Miner. Mh., 9 (1976), p. 406-417.

[6] M. F. Sheridan & C. F. Jr. Royse, Am. Min., 55 (1970), p. 2016-2022.

[7] J. E. Knight, Econ. Geol., 72 (1977), p. 1321-1336.

ALUNIT I NATROALUNIT SA VELIKOG BUKOVIKA

P. Tančić^a, V. Janežić^a

^aGeoinstitut, Rovinjska 12, Beograd, Jugoslavija
e-mail: geoins@EUnet.yu

Rendgenskom kvalitativnom, semikvantitativnom difrakcionom analizom praha određeno je da se u ispitivanom uzorku sa Velikog Bukovika nalaze sledeće mineralne vrste prema stepenu zastupljenosti: alunit (oko 47%), natroalunit (oko 47%), i neznatno jarozit (oko 4%), kvarc (oko 1,5%) i feldspati (oko 0,5%). Preko programa LSUCRIPC [1] izračunate su u prostornoj grupi $R\bar{3}m$ dimenzije jediničnih ćelija (Tabela 1). Hemijska analiza je prvo preračunata na one okside koji teoretski mogu da uđu u sastav minerala alunitske grupe, a zatim je kristalohemijska formula preračunata na 28 O, jer su alunit i natroalunit podjednako zastupljeni. Ovi rezultati su prikazani u tabeli 2. Iz literature [2], [3], [4] i [5] vidi se promena a_0 -ose sa sadržajem Al^{3+} - Fe^{3+} i promena c_0 -ose sa sadržajem Na^+ - K^+ . Iz dijagrama zavisnosti a_0 i c_0 -ose od relativnog atomskog sadržaja K i Na [3], vidi se sledeće: 1. alunit po c_0 -osi pripada tipu sa 82%K : 18%Na; i 2. natroalunit po c_0 -osi pripada tipu sa 62%Na : 38%K. Iz kristalohemijskih formula alunita i natroalunita (Tabela 3), vidi se da je deo alkalija zamenjen sa hidronijum jonom. S obzirom na to i na podatke [2], [3], [4] i [6], i [7], mišljenja smo da su ispitivani alunit i natroalunit (i jarozit) sa Velikog Bukovika najverovatnije postali dijagenetski ili nisko-temperaturno pri kiselim uslovima i sa visokom sulfatnom aktivnošću.

Tabela 1: Izračunate dimenzije jediničnih ćelija alunita, natroalunita i jarozita.

	$a_0(\text{Å})$	$c_0(\text{Å})$	$V_0(\text{Å}^3)$	c_0/a_0
alunit	6,976(1)	17,295(6)	729,0(3)	2,479
natroalunit	6,981(1)	16,884(6)	712,6(3)	2,419
jarozit	7,291(4)	17,23(2)	793(1)	2,363

Tabela 2: Preračunata hemijska analiza (u %) i broj atoma na osnovu 28 O.

	K ₂ O	Na ₂ O	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	SO ₃	H ₂ O
preračunata hemijska analiza	7,00	1,91	37,27	1,27	38,96	13,60
broj atoma na osnovu 28 O	1,21 K	0,50 Na	5,95 Al	0,13 Fe	3,96 S	12,29 H

Tabela 3. Izračunate kristalohemijske formule alunita i natroalunita.

	kristalohemijska formula
alunit	$(K_{0,83}(H_3O)^+_{0,17})_{1,00}Al_{3,00}(S_{0,99}O_4)_2(OH)_6$
natroalunit	$(Na_{0,50}K_{0,38}(H_3O)^+_{0,12})_{1,00}(Al_{2,95}Fe_{0,13})_{3,08}(S_{0,99}O_4)_2(OH)_6$

- [1] R. Garvey, Least-square unit cell refinement, Version 86,2, Dept. of Chemistry, North Dakota State University (1987).
 [2] G. P. Brophy, E. S. Scott & R. A. Snellgrove, Am. Min., 47 (1962), str. 112-126.
 [3] R. L. Parker, Am. Min., 47 (1962), str. 127-136.
 [4] G. P. Brophy & M. F. Sheridan, Am. Min., 50 (1965), str. 1595-1607.
 [5] S. Menchetti & C. Sabelli, N. Jb. Miner. Mh., 9 (1976), str. 406-417.
 [6] M. F. Sheridan & C. F. Jr. Royse, Am. Min., 55 (1970), str. 2016-2022.
 [7] J. E. Knight, Econ. Geol., 72 (1977), str. 1321-1336.