

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО**

**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**23<sup>rd</sup> 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

**23<sup>rd</sup> 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)**

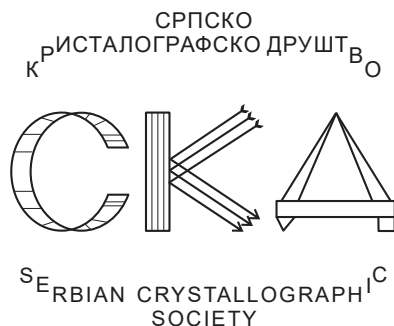
Изводи радова / XXIII конференција Српског кристалографског друштва, Андrevље, [9-11. 6.] 2016. ; [уредник Оливера Клисурић] = Abstracts / 23rd Conference of the Serbian Crystallographic Society, Andrevlje, [9-11. 6.] 2016. ; [editor Olivera Klisurić]. - Београд : Српско кристалографско друштво, 2016 (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**

**23<sup>rd</sup> 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 Оливера Клисурић, ПМФ, Нови Сад  
Др Снежана Зарић, ХФ, Београд  
Др Братислав Антић, „ВИНЧА”, Београд  
Др Горан Богдановић, „ВИНЧА”, Београд  
Др Слађана Новаковић, „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:**

Оливера Клисурић, ПМФ, Нови Сад  
Марко Родић, ПМФ, Нови Сад  
Љиљана Војиновић Јешић, ПМФ, Нови Сад  
Мирјана Радановић, ПМФ, Нови Сад

**Organizing Committee:**

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

## Садржај – Contents

### Пленарна предавања – Plenary Lectures

**P. Roussel**

STRUCTURE SOLUTION AND REFINEMENT OF NANOCRYSTALS USING PRECESSION ELECTRON DIFFRACTION DATA: AN OVERVIEW OF THE LAST ADVANCES..... 2

**B. Spingler**

HOW CAN WE STILL IMPROVE THE GROWTH OF SINGLE CRYSTALS OF SMALL MOLECULES? ..... 5

**E. R.T. Tiekink**

CATION EXCHANGE MEDIATED BY MECHANICAL GRINDING IN ORGANIC SALTS OF DRUGS..... 6

**H. Borrmann**

GHOSTS IN CRYSTAL STRUCTURES ..... 7

**A. Višnjevac, J. Gout, O. Bistri-Aslanoff, O. Reinaud**

SINGLE CRYSTAL X-RAY CRYSTALLOGRAPHY IN THE STUDY OF BIOMIMETIC RESORCINARENE-BASED SUPRAMOLECULAR COMPLEXES..... 8

### Усмена саопштења – Oral Presentations

**Б. М. Француски, С. Б. Новаковић, Г. А. Богдановић, Ђ. Д. Француски**

СТРУКТУРНА И ЕЛЕКТРОНСКА СВОЈСТВА  
4-МЕТИЛТИОСЕМИКАРБАЗОНА 2-ПИРИДИНФОРМАМИДА ..... 10

**B. M. Francuski, S. B. Novaković, G. A. Bogdanović, Đ. D. Francuski**

STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF  
2-PYRIDINEFORMAMIDE 4-METHYLTHIOSEMICARBAZONE ..... 11

**M. V. Rodić, V. M. Leovac, Lj. S. Vojinović-Ješić**

SINTEZE I STRUKTURE KOMPLEKSA Cu(II) SA  
BIS(S-METILIZOTIOSEMIKARBAZONOM) 2,6-DIACETILPIRIDINA..... 12

**M. V. Rodić, V. M. Leovac, Lj. S. Vojinović-Ješić**

SYNTHESES AND STRUCTURES OF Cu(II) COMPLEXES WITH  
2,6-DIACETILPYRIDINE BIS(S-METHYLISOTHTIOSEMICARBAZONE) ..... 13

<b><u>I. Djerdj, B. Marković, J. Popović, T. Weller, Z. Jagličić, Ž. Skoko, D. Pajić, Ch. Suchomski, P. Voepel, R. Marschall, B. M. Smarsly</u></b> PROUČAVANJE MAGNETSKIH SVOJSTAVA KVATERNARNIH TELURATA PEROVSKITNE KRISTALNE STRUKTURE SINTETIZIRANIH MODIFICIRANOM SOL-GEL METODOM .....	14
<b><u>I. Djerdj, B. Marković, J. Popović, T. Weller, Z. Jagličić, Ž. Skoko, D. Pajić, Ch. Suchomski, P. Voepel, R. Marschall, B. M. Smarsly</u></b> AQUEOUS SOL-GEL ROUTE TOWARD SELECTED QUATERNARY METAL OXIDES WITH SINGLE AND DOUBLE PEROVSKITE-TYPE STRUCTURE CONTAINING TELLURIUM .....	15
<b><u>Б. Радиша, Б. Мисаиловић, М. Митровић, А. Жекић</u></b> УТИЦАЈ ПРЕДИСТОРИЈЕ РАСТВОРА НА РАСТ КРИСТАЛА НАТРИЈУМ ХЛОРАТА .....	16
<b><u>B. Radiša, B. Misailović, M. Mitrović, A. Žekić</u></b> THE EFFECT OF SOLUTION HISTORY ON SODIUM CHLORATE CRYSTALS GROWTH RATE .....	17
<b><u>А. Кременовић, Б. Антић</u></b> АНИЗОТРОПНО ШИРЕЊЕ РЕНДГЕНСКИХ ДИФРАКЦИОНИХ МАКСИМУМА МЕШАВИНЕ НАНОШТАПИЋА И НАНОСФЕРА САСТАВА $Fe_{3-x}Y_xO_4$ ( $x=0,00; 0,05; 0,10$ ).....	18
<b><u>A. Kremenović, B. Antić</u></b> ANISOTROPIC BROADENING OF X-RAY DIFFRACTION MAXIMA FOR $Fe_{3-x}Y_xO_4$ ( $x=0.00, 0.05, 0.10$ ) NANORODS AND NANOSPHERES MIXTURE.....	19
<b><u>Д. П. Маленов, А. Ј. Аладић, В. Б. Медаковић, С. Д. Зарић</u></b> ПАРАЛЕЛНЕ ИНТЕРАКЦИЈЕ КООРДИНОВАНИХ ЦИКЛОПЕНТАДИЕНИЛНИХ АНЈОНА .....	20
<b><u>D. P. Malenov, A. J. Aladić, V. B. Medaković, S. D. Zarić</u></b> PARALLEL INTERACTIONS OF COORDINATING CYCLOPENTADIENYL ANIONS .....	21
<b><u>S. Tanase, F. Cimpoesu, M. Ferbinteanu</u></b> STRUKTURNA ANALIZA KATALITIČKI AKTIVNIH METAL-ORGANSKIH MREŽNIH STRUKTURA NA BAZI LANTANOIDA .....	22
<b><u>S. Tanase, F. Cimpoesu, M. Ferbinteanu</u></b> STRUCTURAL ANALYSIS OF LANTHANIDE-BASED METAL ORGANIC FRAMEWORKS WITH CATALYTIC ACTIVITY .....	23
<b><u>Ј. М. Андрић, М. З. Мисини, Ј. С. Муррај, Р. Политцер, В. Б. Медаковић, С. Д. Зарић</u></b> МАПЕ ЕЛЕКТРОСТАТИЧКИХ ПОТЕНЦИЈАЛА И ИНТЕРМОЛЕКУЛСКЕ ИНТЕРАКЦИЈЕ У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА .....	24
<b><u>J. M. Andrić, M. Z. Misini, J. S. Murray, P. Politzer, V. B. Medaković, S. D. Zarić</u></b> MAPS OF ELECTROSTATIC POTENTIALS AND INTERMOLECULAR INTERACTION IN CRYSTAL STRUCTURES .....	25

<b><u>D. Tomović, A. Bukonjić, A. Kočović, M. Nikolić, M. Mijajlović, V. Jevtić, Z. Ratković, G. Bogdanović, S. Novaković, S. Trifunović, G. Radić</u></b> KRISTALNA STRUKTURA BINUKLEARNOG KOMPLEKSA BAKRA(II) SA S-BENZIL DERIVATOM TIOSALICILNE KISELINE .....	26
<b><u>D. Tomović, A. Bukonjić, A. Kočović, M. Nikolić, M. Mijajlović, V. Jevtić, Z. Ratković, G. Bogdanović, S. Novaković, S. Trifunović, G. Radić</u></b> THE CRYSTAL STRUCTURE OF BINUCLEAR COPPER(II) COMPLEX WITH S-BENZYL DERIVATIVE OF THIOSALICYLIC ACID .....	27
<b><u>J. Popović, Ž. Skoko, V. Despoja, I. Lončarić, Z. Popović</u></b> KRISTALI POPUT AKROBATA: STRUKTURNA I TEORIJSKA STUDIJA N'-2-PROPILEN-4-HIDROKSIBENZOHIDRAZIDA .....	28
<b><u>J. Popović, Ž. Skoko, V. Despoja, I. Lončarić, Z. Popović</u></b> WHEN CRYSTAL BEHAVES LIKE AN ACROBATE: THE XRPD AND DFT STUDY OF N'-2-PROPYLIDENE-4-HYDROXYBENZOHYDRAZIDE .....	29

### Постерска саопштења – Poster Presentations

<b><u>J. M. Андрић, M. Z. Misini, J. S. Murray, P. Politzer, С. Д. Зарић</u></b> ВОДНИЧНА ВЕЗА ИЗМЕЂУ КООРДИНОВАНИХ И НЕКООРДИНОВАНИХ МОЛЕКУЛА ВОДЕ: ЕЛЕКТРОСТАТИЧКИ ПОТЕНЦИЈАЛИ И ЕНЕРГИЈЕ ИНТЕРАКЦИЈА .....	32
<b><u>J. M. Andrić, M. Z. Misini, J. S. Murray, P. Politzer, S. D. Zarić</u></b> HYDROGEN BONDING BETWEEN COORDINATED AND NONCOORDINATED WATER MOLECULES: ELECTROSTATIC POTENTIALS AND INTERACTION ENERGIES .....	33
<b><u>Д. Б. Нинковић, Д. З. Војислављевић–Василев, В. Б. Медаковић, M. B. Hall, С. Д. Зарић</u></b> АЛИФАТИЧНО–АРОМАТИЧНЕ СТЕКИНГ ИНТЕРАКЦИЈЕ У ДИМЕРУ ЦИКЛОХЕКСАН–БЕНЗЕН .....	34
<b><u>D. B. Ninković, D. Z. Vojislavljević–Vasilev, V. B. Medaković, M. B. Hall, S. D. Zarić</u></b> ALIPHATIC–AROMATIC STACKING INTERACTIONS IN CYCLO- HEXANE–BENZENE DIMER .....	35
<b><u>J. П. Благојевић, С. Д. Зарић</u></b> СТЕКИНГ ИНТЕРАКЦИЈЕ ЗАСИЋЕНИХ ПЛАНАРНИХ ПРСТЕНОВА ФОРМИРАНИХ ВОДНИЧНИМ ВЕЗИВАЊЕМ .....	36
<b><u>J. P. Blagojević, S. D. Zarić</u></b> STACKING INTERACTIONS OF SATURATED PLANAR HYDROGEN-BRIDGED RINGS .....	37

<b><u>И. М. Станковић, Д. М. Божиновски, С. Д. Зарић</u></b> АРОМАТИЧНО-АРОМАТИЧНЕ ИНТЕРАКЦИЈЕ У АМИЛОИДИМА .....	38
<b><u>I. M. Stanković, D. M. Vožinovski, S. D. Zarić</u></b> AROMATIC-AROMATIC INTERACTIONS IN AMYLOIDS .....	39
<b><u>М. Ђукић, З. Матовић, О. Клисурић</u></b> СИНТЕЗА, КАРАКТЕРИЗАЦИЈА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА [Ru( $\eta^6$ - <i>p</i> -cimen)Cl <sub>2</sub> (5-MA-3-MorphCN-ITZ)] .....	40
<b><u>М. Đukić, Z. Matović, O. Klisurić</u></b> SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND CRYSTAL STRUCTURE OF COMPLEX [Ru( $\eta^6$ - <i>p</i> -cymene)Cl <sub>2</sub> (5-MA-3-MorphCN-ITZ)] .....	41
<b><u>М. М. Радановић, Љ. С. Војиновић-Јешић, М. В. Родић, В. М. Леовац</u></b> СИНТЕЗЕ И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА КОМПЛЕКСА БАКРА(II) СА 2-АЦЕТИЛПИРИДИН-АМИНОГВАНИДИНОМ .....	42
<b><u>M. M. Radanović, Lj. S. Vojinović-Ješić, M. V. Rodić, V. M. Leovac</u></b> SYNTHESES AND CHARACTERIZATION OF COPPER(II) COMPLEXES WITH 2-ACETYLPIRIDINE-AMINOGUANIDINE.....	43
<b><u>А. Коčовић, Д. Томовић, А. Букоњић, М. Никوليћ, М. Мижаловић, В. Јевтић, З. Ратковић, Г. Богдановић, С. Новаковић, С. Трифуновић, Г. Радић</u></b> KRISTALNA STRUKTURA BINUKLEARNOG KOMPLEKSA BAKRA(II) SA S-IZOBUTENIL DERIVATOM THIOSALICILNE KISELINE.....	44
<b><u>А. Коčовић, Д. Томовић, А. Букоњић, М. Никوليћ, М. Мижаловић, В. Јевтић, З. Ратковић, Г. Богдановић, С. Новаковић, С. Трифуновић, Г. Радић</u></b> THE CRYSTAL STRUCTURE OF BINUCLEAR COPPER(II) COMPLEX WITH S-ISOBUTENYL DERIVATIVE OF THIOSALICYLIC ACID.....	45
<b><u>L. D. Попов, Е. А. Распопова, С. I. Levchenkov, А. N. Morozov, I. N. Shcherbakov, А. S. Burlov, Г. G. Alexandrov</u></b> ФЕРОЦЕНОИЛХИДРАЗОН 2- <i>N</i> -ТОЗИЛАМИНОБЕНЗАЛДЕХИДА: КРИСТАЛНА СТРУКТУРА И КВАНТНО-ХЕМИЈСКИ ПРОРАЧУНИ .....	46
<b><u>L. D. Попов, Е. А. Распопова, С. I. Levchenkov, А. N. Morozov, I. N. Shcherbakov, А. S. Burlov, Г. G. Alexandrov</u></b> FERROCENYLHYDRAZONE OF 2- <i>N</i> -TOSYLAMINOBENZALDEHYDE: CRYSTAL STRUCTURE AND QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS.....	47
<b><u>Н. Р. Филиповић, А. С. Малешевић, Т. Р. Тодоровић, О. Р. Клисурић</u></b> KRISTALNE STRUKTURE (2-(PIRIDIN-2-IL)-1H-INDOL-3-IL)(3,4,5-TRIMETHOXIFENIL)-METANONA (HL) I NJEGOVIH KOMPLEKSA SA Cu(II) I Pd(II).....	48
<b><u>Н. Р. Филиповић, А. С. Малешевић, Т. Р. Тодоровић, О. Р. Клисурић</u></b> 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

<b><u>Lj. Suručić, G. Janjić, Z. Sandić, B. Ekmešćić, A. Nastasović</u></b> KRISTALOGRAFSKO I KVANTNO-HEMIJSKO ISPITIVANJE KOMPLEKSA METALA SA AMINO DERIVATIMA .....	50
<b><u>Lj. Suručić, G. Janjić, Z. Sandić, B. Ekmešćić, A. Nastasović</u></b> CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF THE METAL COMPLEX WITH AMINO DERIVATIVES .....	51
<b><u>A. Bukonjić, D. Tomović, A. Kočović, M. Nikolić, M. Mijajlović, V. Jevtić, Z. Ratković, G. Bogdanović, S. Novaković, S. Trifunović, G. Radić</u></b> DVA POLIMORFA BINUKLEARNOG KOMPLEKSA BAKRA(II) SA S-PROPIl DERIVATOM TIOSALICILNE KISELINE .....	52
<b><u>A. Bukonjić, D. Tomović, A. Kočović, M. Nikolić, M. Mijajlović, V. Jevtić, Z. Ratković, G. Bogdanović, S. Novaković, S. Trifunović, G. Radić</u></b> TWO POLYMORPHS OF BINUCLEAR COPPER(II) COMPLEX WITH S-PROPYL DERIVATIVE OF THIOSALICYLIC ACID.....	53
<b><u>B. Čobeljić, A. Pevec, I. Turel, M. Milenković, G. Brađan, D. Radanović, K. Anđelković</u></b> SINTEZA I KARAKTERIZACIJA PENTAGONALNO-BIPIRAMIDALNOG KOMPLEKSA Zn(II) SA 2,6-DIACETIPRIDIN BIS(TRIMETILAMONIJUMA- CETOHIDRAZONOM).....	54
<b><u>B. Čobeljić, A. Pevec, I. Turel, M. Milenković, G. Brađan, D. Radanović, K. Anđelković</u></b> SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF PENTAGONAL-BIPYRIMI- DAL Zn(II) COMPLEX WITH 2,6-DIACETYLPYRIDINE BIS(TRI- METHYLAMMONIUMACETOHYDRAZONE) .....	55
<b><u>V. S. Miškov, M. V. Rodić, Lj. S. Vojinović-Ješić, V. M. Leovac</u></b> KRISTALNE STRUKTURE PRVIH KOMPLEKSA KOBALTA(II) SA TIOSE- MIKARBAZONOM METILPIRUVATA .....	56
<b><u>V. S. Miškov, M. V. Rodić, Lj. S. Vojinović-Ješić, V. M. Leovac</u></b> CRYSTAL STRUCTURE OF THE FIRST COBALT(II) COMPLEXES WITH METHYL PYRUVATE THIOSEMICARBAZONE .....	57
<b><u>J. M. Vujić, A. Hatzidimitriou, S. R. Trifunović, A. Geronikaki, D. Papagiannopoulou</u></b> KRISTALNA STRUKTURA BAKAR(II)-KOMPLEKSA SA 2-(2-FENIL-TIAZOL-4-ILMETILSULFANIL)-ETILAMINOM.....	58
<b><u>J. M. Vujić, A. Hatzidimitriou, S. R. Trifunović, A. Geronikaki, D. Papagiannopoulou</u></b> CRYSTAL STRUCTURE OF COPPER(II) COMPLEX WITH 2-(2-PHENYL-THIAZOL-4-YLMETHYLSULFANYL)-ETHYLAMINE .....	59



<b><u>L. Radovanović, J. Rogan, D. Poleti</u></b> KRISTALNA STRUKTURA KOMPLEKSA KOBALTA(II) SA 2,2'-BIPYRIDINOM I ANJONOM MELITNE KISELINE .....	60
<b><u>L. Radovanović, J. Rogan, D. Poleti</u></b> CRYSTAL STRUCTURE OF COBALT(II) COMPLEX WITH 2,2'-BIPYRIDINE AND ANION OF MELLITIC ACID .....	61
<b><u>D. Radanović, A. Pevec, I. Turel, M. Milenković, B. Čobeljić, G. Brađan, K. Anđelković</u></b> SINTEZA I KARAKTERIZACIJA PENTAGONALNO BIPIRAMIDALNIH KOMPLEKSA Fe(III) SA 2,6-DIACETIL-PIRIDIN BIS(TRIMETILAMONI- JUMACETOHIDRAZONOM).....	62
<b><u>D. Radanović, A. Pevec, I. Turel, M. Milenković, B. Čobeljić, G. Brađan, K. Anđelković</u></b> SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF PENTAGONAL BIPYRAMI- DAL Fe(III) COMPLEXES WITH 2,6-DIACETYL-PYRIDINE BIS(TRI- METHYLAMMONIUMACETOHYDRAZONE) .....	63
<b><u>P. Dabić, S. Kovač, A. Zdravković</u></b> SEKUNDARNI SULFATNI MINERALI NASTALI ALTERACIJOM PIRITA.....	64
<b><u>P. Dabić, S. Kovač, A. Zdravković</u></b> SECONDARY SULFATE MINERALS ASSOCIATED WITH THE WEATHERING OF PYRITE .....	65
<b><u>A. Dapčević, D. Luković Golić, A. Radojković, J. Ćirković, G. Branković, Z. Branković</u></b> BIZMUT-FERIT DOPIRAN GADOLINIJUMOM .....	66
<b><u>A. Dapčević, D. Luković Golić, A. Radojković, J. Ćirković, G. Branković, Z. Branković</u></b> GADOLINIUM DOPED BISMUTH FERRITE .....	67
<b><u>A. Кременовић, Ј. Блануша, Ч. Јовалекић, В. Антић, В. Спасојевић, М. Бошковић</u></b> МЕХАНОХЕМИЈСКА СИНТЕЗА $\text{NaZn}(\text{BH}_4)_3$ И $\text{NaMn}(\text{BH}_4)_3$ БОРОХИДРИДА .....	68
<b><u>A. Kremenović, J. Blanuša, Č. Jovalekić, B. Antić, V. Spasojević, M. Bošković</u></b> SYNTHESIS OF $\text{NaZn}(\text{BH}_4)_3$ AND $\text{NaMn}(\text{BH}_4)_3$ BOROHYDRIDES BY SOFT MECHANOCHEMISTRY .....	69
<b><u>П. Танчић, А. Кременовић, П. Вулић</u></b> СТРУКТУРНА ДЕСИМЕТРИЗАЦИЈА ГРАНДИТА СА МЕКЕ ПРЕСЕДЛЕ (КОПАОНИК, СРБИЈА) .....	70
<b><u>P. Tančić, A. Kremenović, P. Vulić</u></b> STRUCTURAL DISSYMMETRIZATION OF GRANDITE FROM MEKA PRESEDLA (КОПАОНИК Mt., SERBIA) .....	71

<b><u>T. Ђорђевић, Љ. Карановић</u></b> АРСЕНАТИ У СИСТЕМУ CdO/MO/As <sub>2</sub> O <sub>5</sub> (M <sup>2+</sup> = Mg, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) СТРУКТУРНО СЛИЧНИ МИНЕРАЛИМА: Cd <sub>1,25</sub> Zn <sub>0,75</sub> (HAsO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·2H <sub>2</sub> O И МИ- НЕРАЛ ФЛУКИТ .....	72
<b><u>T. Đorđević, Lj. Karanović</u></b> MINERAL-RELATED ARSENATES IN THE SYSTEM CdO/MO/As <sub>2</sub> O <sub>5</sub> (M <sup>2+</sup> = Mg, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn): Cd <sub>1,25</sub> Zn <sub>0,75</sub> (HAsO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·2H <sub>2</sub> O AND MINERAL FLUCKITE .....	73
<b><u>O. Klisurić, I. Kuzminac, V. Kojić, M. Sakač</u></b> RENDGENSKA STRUKTURNA ANALIZA I ANTIPROLIFERATIVNA AKTIVNOST C16 STEROIDNIH OKSIMA.....	74
<b><u>O. Klisurić, I. Kuzminac, V. Kojić, M. Sakač</u></b> X-RAY STRUCTURAL ANALYSIS AND ANTIPROLIFERATIVE ACTIVITY OF C16 STEROIDAL OXIMES .....	75
<b><u>S. Bjedov, M. Sakač, O. Klisurić</u></b> MOLEKULSKA I KRISTALNA STRUKTURA 7β-METIL DERIVATA HOLNE KISELINE.....	76
<b><u>S. Bjedov, M. Sakač, O. Klisurić</u></b> MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURE OF 7β-METHYL DERIVATIVE OF CHOLIC ACID .....	77
<b><u>I. Kovačević, M. Rodić, B. Srećo Zelenović, J. Francuz, G. Benedeković, M. Svirčev, M. Popsavin, V. Popsavin</u></b> KRISTALNA I MOLEKULSKA STRUKTURA NOVOG ANALOGA (+)-GONIOFUFURONA SA AZIDNOM FUNKCIJOM.....	78
<b><u>I. Kovačević, M. Rodić, B. Srećo Zelenović, J. Francuz, G. Benedeković, M. Svirčev, M. Popsavin, V. Popsavin</u></b> CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF NOVEL (+)-GONIOFUFURONE ANALOGUE WITH AZIDE FUNCTIONAL GROUP .....	79
<b><u>J. M. Francuz, M. Rodić, B. Srećo Zelenović, I. Kovačević, G. Benedeković, M. Svirčev, M. Popsavin, V. Popsavin</u></b> MOLEKULSKE I KRISTALNE STRUKTURE KLJUČNIH INTERMEDIJERA U SINTEZI 5-O-METIL-(+)-GONIOFUFURONA .....	80
<b><u>J. M. Francuz, M. Rodić, B. Srećo Zelenović, I. Kovačević, G. Benedeković, M. Svirčev, M. Popsavin, V. Popsavin</u></b> MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF KEY INTERMEDIATES IN SYNTHESIS OF 5-O-METHYL-(+)-GONIOFUFURONE .....	81
<b><u>J. J. Plavša, S. Bekić, M. Mariновић, A. Ђелић, E. T. Петри</u></b> РАЗВОЈ ПРОТОКОЛА ЗА КРИСТАЛИЗАЦИЈУ АЛДО-КЕТО РЕДУКТАЗЕ 1Ц3 (АКР1Ц3) .....	82
<b><u>J. J. Plavša, S. Bekić, M. Marinović, A. Čelić, E. T. Petri</u></b> DEVELOPMENT OF A PROTOCOL FOR CRYSTALLISATION OF ALDO-KETO REDUCTASE 1C3 (AKR1C3).....	83

---

<b>D. Stojković, V. Jevtić, S. Trifunović, N. Vuković, M. Vukić, I. Potočňák, E. Avdović, S. Jovičić</b> SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA 3-(1-(3-HIDROKSIPROPILAMINO)ETILIDEN)HROMAN-2,4-DIONA .....	84
<b>D. Stojković, V. Jevtić, S. Trifunović, N. Vuković, M. Vukić, I. Potočňák, E. Avdović, S. Jovičić</b> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF 3-(1-(3-HYDROXYPROPYLAMINO)ETHYLIDENE)CHROMAN-2,4-DIONE.....	85
<b>A. Laziћ, N. Trišović, L. Radovanović, Ž. Vitnik, V. Vitnik, J. Rogan, D. Poleti, G. Ušćumliћ</b> СТРУКТУРНА И СLP АНАЛИЗА 3-[(4-БРОМОФЕНИЛ)МЕТИЛ]-1,3- ДИАЗАСПИРО[4.4]НОНАН-2,4-ДИОНА .....	86
<b>A. Lazić, N. Trišović, L. Radovanović, Ž. Vitnik, V. Vitnik, J. Rogan, D. Poleti, G. Ušćumlić</b> STRUCTURAL AND CLP ANALYSIS OF 3-[(4-BROMOPHENYL)METHYL]- 1,3-DIAZASPIRO[4.4]NONANE-2,4-DIONE .....	87
<b>M. Мариновић, Е. Петри, А. Ћелић</b> УПОРЕДНА МОЛЕКУЛАРНА ДИНАМИКА АНДРОГЕНОГ И ЕСТРОГЕНИХ РЕЦЕПТОРА СА ВЕЗАНИМ АГОНИСТИМА И АНТАГОНИСТИМА .....	88
<b>M. Marinović, E. Petri, A. Ćelić</b> COMPARATIVE MOLECULAR DYNAMICS OF ANDROGEN AND ESTROGEN RECEPTORS BOUND TO AGONISTS AND ANTAGONISTS .....	89
<b>M. Цветинов, М. Стојановић, М. Цакић, С. Глишић, Г. Николић, Г. М. Николић, К. Цакић</b> ФАЗНА АНАЛИЗА НАНОЧЕСТИЦА СРЕБРА СТАБИЛИЗОВАНИХ У ДЕКСТРАН СУЛФАТУ .....	90
<b>M. Cvetinoy, M. Stojanović, M. Cakić, S. Glišić, G. Nikolić, G. M. Nikolić, K. Cakić</b> PHASE ANALYSIS OF DEXTRAN SULPHATE STABILIZED SILVER NA- NOPARTICLES .....	91
<b>S. Panić, G. Bošković, I. Borišev, Ž. Cvejić, S. Rakić, E. Đurđić, A. Đorđević</b> SINTEZA KRATKIH VIŠESLOJNIH UGLJENIČNIH NANOCEVI I NJIHOVIH BROMNIH DERIVATA .....	92
<b>S. Panić, G. Bošković, I. Borišev, Ž. Cvejić, S. Rakić, E. Đurđić, A. Đorđević</b> SYNTHESIS OF SHORT MULTIWALLED CARBON NANOTUBES AND THEIR BROMINE DERIVATIVES .....	93

---

<b><u>N. Joviћ Orsini, V. Spasojeviћ, Ђ. Ф. Гоја</u></b> СПОСОБНОСТ ГРЕЈАЊА ФЕРОФЛУИДА СИНТЕТИСАНИХ ТЕРМИЧКОМ РАЗГРАДЊОМ СОЛИ Fe(acac) <sub>3</sub> У ОРГАНСКОМ РАСТВОРАЧУ .....	94
<b><u>N. Jović Orsini, V. Spasojević, G. F. Goya</u></b> THE INHERENT HEATING ABILITY OF FERROFLUIDS SYNTHESIZED BY THERMAL DECOMPOSITION METHOD OF Fe(acac) <sub>3</sub> SALT IN ORGANIC MEDIA .....	95
<b><u>G. Janjić, D. Milojkov, V. Stanić</u></b> MODEL SISTEMI ZA FLUORESCENCIJU FLUORAPATITA ZASNOVANI NA KRISTALOGRAFSKIM I KVANTNO-HEMIJSKIM PODACIMA.....	96
<b><u>G. Janjić, D. Milojkov, V. Stanić</u></b> MODEL SYSTEMS FOR FLUORESCENCE OF FLUORAPATITE BASED ON CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL DATA.....	97
<b><u>M. Wedel, P. Manuel, A. Markvardsen</u></b> PROŠIRIVANJE MANTID-OVE PODRŠKE ZA KRISTALOGRAFIJU .....	98
<b><u>M. Wedel, P. Manuel, A. Markvardsen</u></b> EXTENDING MANTID'S SUPPORT FOR CRYSTALLOGRAPHY .....	99

## СТРУКТУРНА ДЕСИМЕТРИЗАЦИЈА ГРАНДИТА СА МЕКЕ ПРЕСЕДЈЕ (КОПАОНИК, СРБИЈА)

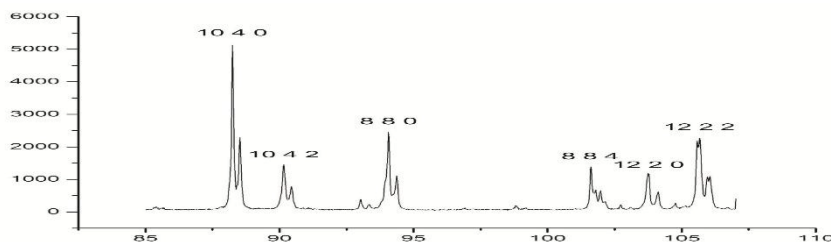
П. Танчић<sup>1</sup>, А. Кременовић<sup>2</sup>, П. Вулић<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Геолошки завод Србије, Ровињска 12, Београд; <sup>2</sup>Рударско-геолошки факултет, Бушина 7, Београд

e-mail: pavletan@gmail.com

Састав проучаваног макроскопски зонарног грандита са локалитета Мека Преседла (Копаник, Србија) показује промене у саставима:  $\text{Ca}_{2,93-2,97}\text{Mn}_{0,05-0,06}\text{Mg}_{0,00-0,01}\text{Al}_{1,14-1,26}\text{Fe}^{3+}_{0,72-0,83}\text{Ti}_{0,00-0,02}\text{Si}_{2,97-3,02}\text{O}_{12}$ , односно  $\text{Grs}_{58-64}\text{Adr}_{36-41}\text{Sps}_2$  [1–3]. Овакав хемијски састав указује да је једина значајнија варијација установљена само код  $\text{Al-Fe}^{3+}$  расподела у октаедарском положају. Пет макроскопски различитих зона у оквиру испитиваног грандита имају релативно високо хомогене саставе:  $\text{Grs}_{64\pm 1}\text{Adr}_{36\pm 1}\text{Sps}_2$  (А),  $\text{Grs}_{62\pm 1}\text{Adr}_{38\pm 1}\text{Sps}_2$  (В),  $\text{Grs}_{59\pm 2}\text{Adr}_{40\pm 2}\text{Sps}_2$  (С),  $\text{Grs}_{58\pm 2}\text{Adr}_{41\pm 2}\text{Sps}_2$  (D) и  $\text{Grs}_{58\pm 1}\text{Adr}_{41\pm 1}\text{Sps}_2$  (Е), који су потврђени рендгенским, ИЦ и Раман спектроскопским проучавањима [1–3]. Услови постанка су процењени на:  $t \sim 650\text{--}690$  (715) °C,  $p = 2\text{--}3$  кбага и  $X_{\text{CO}_2} \geq 0,6$  [3].

Проучавани грандит показује многа одступања од тесералне симетрије и номинално додељене  $Ia\bar{3}d$  просторне групе, укључујући анизотропију, ротацију тетраедра, полиедарске дисторзије, итд. [1]. Такође, поједини дифракциони максимуми показују јасно изражене дублете аргументовано указујући на десиметризацију (слика 1) [1, 3].



Слика 1. Рендгенски дифрактограм праха проучаване зоне А од 85° до 107° 2θ.

Структура грандита је одређивана Rietveld методом у бројним просторним групама, са циљем да се одреди егзактна просторна група кристализације [3]. Добијени резултати на основу многобројних примењених критеријума несумњиво указују да проучавани грандит кристалише у  $Fddd$  или  $R\bar{3}c$  просторним групама, од којих је прва знатно вероватнија. Претходно је десиметризација грандита утврђена само код врло малог броја узорака, и то у  $Fddd$  и  $I\bar{1}$  просторним групама методом дифракције са монокристала [3].

[1] П. Танчић, *Мајстарски рад*, (2008).

[2] P. Tančić, P. Vulić, R. Kaindl, B. Sartory, R. Dimitrijević, *Acta Geologica Sinica*, **86** (2012) 393–406.

[3] П. Танчић, *Докторска дисертација*, (2016).

## STRUCTURAL DISSYMMETRIZATION OF GRANDITE FROM MEKA PRESEDLA (KOPAONIK Mt., SERBIA)

P. Tančić<sup>1</sup>, A. Kremenović<sup>2</sup>, P. Vulić<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Geological Survey of Serbia, Rovinjska 12, Belgrade; <sup>2</sup>Faculty of Mining and Geology, Dušina 7, Belgrade

e-mail: pavletan@gmail.com

Composition of the studied macroscopically zoned grandite from the Meka Presedla locality (Kopaonik Mt., Serbia) showing compositional variations:  $\text{Ca}_{2,93-2,97}\text{Mn}_{0,05-0,06}\text{Mg}_{0,00-0,01}\text{Al}_{1,14-1,26}\text{Fe}^{3+}_{0,72-0,83}\text{Ti}_{0,00-0,02}\text{Si}_{2,97-3,02}\text{O}_{12}$ , i.e.  $\text{Grs}_{58-64}\text{Adr}_{36-41}\text{Sps}_2$  [1–3]. Such chemical composition indicate that the only one significant variation was established only for Al–Fe<sup>3+</sup> distribution within the octahedral position. Five macroscopically different zones within the studied grandite have relatively high homogeneity composition levels:  $\text{Grs}_{64\pm 1}\text{Adr}_{36\pm 1}\text{Sps}_2$  (A),  $\text{Grs}_{62\pm 1}\text{Adr}_{38\pm 1}\text{Sps}_2$  (B),  $\text{Grs}_{59\pm 2}\text{Adr}_{40\pm 2}\text{Sps}_2$  (C),  $\text{Grs}_{58\pm 2}\text{Adr}_{41\pm 2}\text{Sps}_2$  (D) and  $\text{Grs}_{58\pm 1}\text{Adr}_{41\pm 1}\text{Sps}_2$  (E), which were confirmed by X-ray, IR and Raman spectroscopical studies [1–3]. Formation conditions were estimated to:  $t \sim 650\text{--}690$  (715) °C,  $p = 2\text{--}3$  kbars and  $X_{\text{CO}_2} \geq 0.6$  [3].

Studied grandite showing many deviations from cubic symmetry and nominally assigned  $Ia\bar{3}d$  space group, including anisotropy, tetrahedron rotations, polyhedral distortions, etc. [1]. Also, some diffraction maximums showing clearly visible doublets which reasonably indicating to the dissymmetrization (Fig. 1) [1, 3].

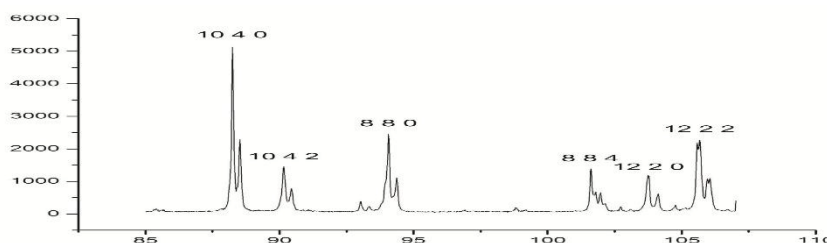


Fig. 1. X-ray powder diffraction pattern of the studied zone A from 85° to 107° 2θ.

Grandite structure was refined with Rietveld method in numerous space groups, with a goal of determination of its exactly crystallization space group [3]. The obtained results at basis of the numerous applied criterions undoubtedly indicate that the studied grandite crystallize in  $Fddd$  or  $R\bar{3}c$  space groups, whereby is the first one with quite more probability. Grandite dissymmetrization was previously established only at very small number of specimens, and in  $Fddd$  and  $I\bar{1}$  space groups by X-ray single crystal diffraction method [3].

[1] P. Tančić, *Master's Thesis*, (2008).

[2] P. Tančić, P. Vulić, R. Kaindl, B. Sartory, R. Dimitrijević, *Acta Geologica Sinica*, **86** (2012) 393–406.

[3] P. Tančić, *Doctoral Dissertation*, (2016).