

Srpsko hemijsko društvo



Serbian Chemical Society

**56. SAVETOVANJE
SRPSKOG HEMIJSKOG
DRUŠTVA**

**KRATKI IZVODI
RADOVA**

**56th MEETING OF
THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY**

Book of Abstracts

Niš 7. i 8. juni 2019.
Niš, Serbia, June 7-8, 2019

CIP - Katalogizacija u publikaciji
Narodna biblioteka Srbije, Beograd

54(048)
577.1(048)
66(048)
66.017/.018(048)
502/504(048)

СРПСКО хемијско друштво. Саветовање (56 ; 2019 ; Ниш)

Kratki izvodi radova = Book of Abstracts / 56. savetovanje Srpskog hemijskog društva , Niš 7. i 8. juni 2019. = 56th meeting of the Serbian chemical society, Niš, Serbia, June 7-8, 2019 ; [urednici, editors Dušan Sladić, Niko Radulović, Aleksandar Dekanski]. - Beograd : Srpsko hemijsko društvo = Serbian Chemical Society, 2019 (Beograd : Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva TMF). - 102 str. : ilustr. ; 25 cm

Tekst ćir. i lat. - Tiraž 30. - Bibliografija uz pojedine radove.

ISBN 978-86-7132-073-3

a) Хемија -- Апстракти б) Биохемија -- Апстракти в) Технологија -- Апстракти г) Наука о материјалима -- Апстракти д) Животна средина -- Апстракти

COBISS.SR-ID 276591116

56. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA

Niš, 7 i 8 juni 2019.

KRATKI IZVODI RADOVA

56th MEETING OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY

Niš, Serbia, June 7-8, 2019

BOOK OF ABSTRACTS

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

Vesna Mišković STANKOVIĆ, predsednik Društva

Urednici / Editors

Dušan SLADIĆ

Niko RADULOVIĆ

Aleksandar DEKANSKI

Dizajn korica, slog i kompjuterska obrada teksta

Cover Design, Page Making and Computer Layout

Aleksandar DEKANSKI

Tiraž / Circulation

30 primeraka / 30 Copy Printing

ISBN 978-86-7132-073-3

Štampa / Printing

Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva, Tehnološko-metalurški fakultet, Karnegejeva 4, Beograd, Srbija

Naučni Odbor
Scientific Committee

Dušan Sladić, predsednik/chair
Vesna Mišković-Stanković
Niko Radulović
Gordana Stojanović
Snežana Tošić
Aleksandra Pavlović
Aleksandra Zarubica
Tatjana Anđelković
Miloš Đuran
Ljiljana Jovanović
Marija Sakač
Janoš Čanadi
Velimir Popsavin
Mirjana Popsavin
Katarina Anđelković
Dragica Trivić
Maja Gruden Pavlović
Tanja Ćirković Veličković
Maja Radetić



Organizacioni Odbor
Organising Committee

Niko Radulović, predsednik/chair
Aleksandar Dekanski
Danijela Kostić
Dragan Đorđević
Emilija Pecev Marinković
Marija Genčić
Ana Miltojević
Milan Stojković
Milan Nešić
Milica Nikolić
Marko Mladenović
Dragan Zlatković
Miljana Đorđević
Milena Živković
Sonja Filipović
Milica Stevanović
Jelena Aksi



Savetovanje podržalo / Supported by



Ministarstvo prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije
Ministry of Education, Science and Technological Development of Republic of Serbia

Ova knjiga sadrži **kratke izvode**
dva Plenarna predavanja (**PP**),
šest Predavanja po pozivu (**PPP**) i
93 saopštenja prihvaćena
za prezentovanje na **56. savetovanju SHD**,
od čega 14 usmenih (**O**) i 79 posterskih (**P**) saopštenja.

Radovi (obima od najmanje četiri stranice)
pojedinih saopštenja publikovani su elektronski,
u posebnoj publikaciji dostupnoj na adresi:
www.shd.org.rs/56SHD/Knjiga-radova.pdf
Na desnoj strani iznad naslova njihovih kratkih izvoda
nalazi se informacija o tome.

This book contains **Short Abstracts** of
2 Plenary Lectures (**PP**), 6 Invited Lectures (**PPP**) and
93 contributions accepted
for the presentation at the **56th SCS Meeting**,
of which 14 oral (**O**) and 79 poster (**P**) presentations.

The **Proceedings** of some of the contributions
are published at: www.shd.org.rs/56SHD/Knjiga-radova.pdf
Information on this is placed on the right-hand side,
above titles of Abstracts.

Kakva je priroda vezivanja BF_4^- , NO_3^- i ClO_4^- za komplekse Cu(II) sa Žirarovim T hidrazidom? Kada mogu nastati binuklearni kompleksi?

Matija Zlatar, Božidar Čobeljić*, Maja Gruden*, Katarina Anđelković*

Centar za hemiju, Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerzitet u Beogradu,

**Univerzitet u Beogradu-Hemijski fakultet*

Četiri kompleksa, $[\text{CuLCl}]\text{BF}_4$, $[\text{CuLCl}]\text{NO}_3$, $[\text{Cu}_2\text{L}_2\text{Cl}_2](\text{BF}_4)_2$ i $[\text{CuLCl}]\text{ClO}_4$, sa istim $[\text{CuLCl}]^+$ fragmentom ($\text{L}=(E)\text{-}N,N,N\text{-trimethyl-2-oxo-2-(2-(1-(pyridin-2-yl)ethylidene)hydrazinyl)ethan-1-amin}$) su okarakterisani metodom difrakcije X-zraka. Na osnovu dužina veza, formule kompleksa su napisane tako da je $[\text{CuLCl}]^+$ unutrašnja sfera kompleksa, a BF_4^- , NO_3^- i ClO_4^- pripadaju spoljašnjoj sferi. Proračuni zasnovani na Teoriji funkcionala gustine, u kojoj je disperzija korigovana na ne-lokalan način, na strukturama dobijenim difrakcijom X-zraka, su izvedeni u cilju razjašnjavanja prirode interakcija anjona sa Cu(II) jonom. Rezultati različitih analiza, kao što su dekompozicija interakcione energije, indeks nekovalentnih interakcija, model nezavisnog gradijenta i kvantna teorija atoma u molekulima, pokazuju da su anjoni u mononuklearnim kompleksima slabo koordinovani, dok je BF_4^- u binuklearnom kompleksu kontra jon, elektrostatički vezan za unutrašnju sferu. Takođe, proračuni objašnjavaju činjenicu da je samo kompleks $[\text{Cu}_2\text{L}_2\text{Cl}_2](\text{BF}_4)_2$ binuklearni sa mostnim Cl^- jonima. Ova studija pokazuje da se nedoumice oko koordinacionog broja u realnim kristalnim strukturama kompleksa mogu otkloniti detaljnom analizom elektronske gustine.

What is the nature of binding of BF_4^- , NO_3^- and ClO_4^- to Cu(II) complexes with Girard's T hydrazine? When can binuclear complexes be formed?

Matija Zlatar, Božidar Čobeljić*, Maja Gruden*, Katarina Anđelković*

*Department of chemistry, Institute of chemistry, technology and metallurgy, University of Belgrade, *University of Belgrade-Faculty of chemistry*

Four complexes, $[\text{CuLCl}]\text{BF}_4$, $[\text{CuLCl}]\text{NO}_3$, $[\text{Cu}_2\text{L}_2\text{Cl}_2](\text{BF}_4)_2$ and $[\text{CuLCl}]\text{ClO}_4$ having the same $[\text{CuLCl}]^+$ moiety, ($\text{L}=(E)\text{-}N,N,N\text{-trimethyl-2-oxo-2-(2-(1-(pyridin-2-yl)ethylidene)hydrazinyl)ethan-1-amin}$), were characterized by single crystal X-ray diffraction methods. According to the bond distances, the formulas have been written such that $[\text{CuLCl}]^+$ is the inner sphere, while BF_4^- , NO_3^- and ClO_4^- belong to the outer sphere. Non-local density-dependent dispersion corrected Density functional theory (DFT) calculations on the X-ray structures have been performed to rationalize interactions of anions to the Cu(II) ion. Results of analysis based on energy decomposition, Non-Covalent Interactions Index, Independent Gradient Model analysis, and Quantum Theory of Atoms in Molecules revealed that in mononuclear complexes, anions are weakly coordinated, while in binuclear complex, BF_4^- is counter-anion, electrostatically bonded to the inner sphere. Furthermore, DFT calculations rationalized the fact that only complex $[\text{Cu}_2\text{L}_2\text{Cl}_2](\text{BF}_4)_2$ is binuclear with bridging Cl^- ions. The present study shows that ambiguity about actual coordination number in the real crystal structures of coordination compounds can be solved with thorough analysis of the electron density.