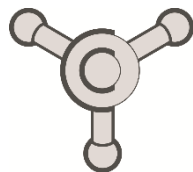




Serbian Chemical Society  
**Српско хемијско друштво**  
Клуб младих хемичара Србије  
Serbian Young Chemists' Club



# ЧЕТВРТА КОНФЕРЕНЦИЈА МЛАДИХ ХЕМИЧАРА СРБИЈЕ КРАТКИ ИЗВОДИ РАДОВА

**Book of  
Abstracts**

Fourth Conference of  
Young Chemists of Serbia

Београд, 5. новембар 2016.  
Belgrade, Serbia, November 5, 2016



CIP - Каталогизација у публикацији  
Народна библиотека Србије, Београд

54(048)(0.034.2)  
577.1(048)(0.034.2)  
60(048)(0.034.2)  
66.017/.018(048)(0.034.2)

КОНФЕРЕНЦИЈА Младих хемичара Србије (4 ; 2016 ; Београд)

Кратки изводи радова [Електронски извор] / Четврта конференција младих хемичара Србије, Београд, 5. новембар 2016. = Book of Abstracts / Fourth Conference of Young Chemists of Serbia, Belgrade, Serbia, November 5, 2016 ; [уредници Тамара Тодоровић, Игор Опсеница, Александар Декански]. - Београд : Српско хемијско друштво, 2016 (Београд : Развојно-истраживачки центар графичког инжењерства ТМФ). – 1 електронски оптички диск (CD-ROM) ; 12 cm

Системски захтеви: Нису наведени. - Насл. са насловне стране документа. - На врху насл. стр.: Клуб младих хемичара Србије. - Упоредо срп. текст и енгл. превод. - Текст ћир. и лат. - Тираж 140

ISBN 978-86-7132-064-1

а) Хемија - Апстракти б) Биохемија - Апстракти с) Биотехнологија - Апстракти д)  
Наука о материјалима - Апстракти  
COBISS.SR-ID 226696204

**ЧЕТВРТА КОНФЕРЕНЦИЈА МЛАДИХ ХЕМИЧАРА СРБИЈЕ**  
**FOURTH CONFERENCE OF YOUNG CHEMISTS OF SERBIA**  
**БЕОГРАД 5. НОВЕМБАР 2016. / BELGRADE, NOVEMBER 5, 2016**  
**КРАТКИ ИЗВОДИ РАДОВА / BOOK OF ABSTRACTS**

*Издаје / Published by*

**Српско хемијско друштво / Serbina Chemical Society**

Карнегијева 4/III, 11000 Београд, Србија / Karnegijeva 4/III, 11000 Belgrade, Serbia  
+381 11 3370 467; www.shd.org.rs; office@shd.org.rs

*За издавача / For Publisher*

**Живослав ТЕШИЋ, председник Друштва / Živoslav TEŠIĆ, president**

*Уредници / Editors*

**Тамара ТОДОРОВИЋ / Tamara TODOROVIĆ**

**Игор ОПСЕНИЦА / Igor OPSENICA**

**Александар ДЕКАНСКИ / Aleksandar DEKANSKI**

*Дизајн, слог и компјутерска обрада / Page Layout and Design*

**Александар ДЕКАНСКИ / Aleksandar DEKANSKI**

*Тираж / Circulation*

**140 примерака / 140 copy**

**ISBN 978-86-7132-064-1**

*Умножавање / Copying*

**Развојно-истраживачки центар графичког инжењерства,  
Технолошко-металуршки факултет, Карнегијева 4, Београд, Србија**

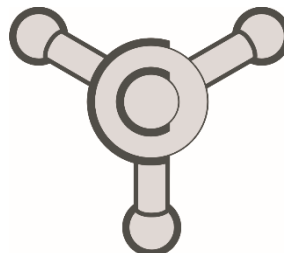
Development and Research Centre of Graphic Engineering  
Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

## НАУЧНИ ОДБОР

*Др Тамара ТОДОРОВИЋ*  
*Др Игор ОПСЕНИЦА*

## SCIENTIFIC COMMITTEE

*Dr Tamara TODOROVIĆ*  
*Dr Igor OPSENICA*



## ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР

*Живота СЕЛАКОВИЋ*  
*Вук ФИЛИПОВИЋ*  
*Јелена РАДИВОЈЕВИЋ*

## ORGANIZING COMMITTEE

*Života SELAKOVIĆ*  
*Vuk FILIPOVIĆ*  
*Jelena RADIVOJEVIĆ*



---

Одржавање конференције  финансијски је помогло  
Министарство просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије

TH P 06

**Analiza Jahn-Teller-ovog efekta u organskim i neorganskim sistemima**

Ljubica D. Andjelković, Matija S. Zlatar, Maja A. Gruden\*

*Centar za Hemiju, Institut za Hemiju, Tehnologiju i Metalurgiju, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 12-16, Beograd, Srbija, \*Hemijski fakultet, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 12-16, Beograd, Srbija*

Po Jahn-Teller-ovoj (JT) teoremi svi nelinearni molekuli sa degenerisanim elektronskim stanjem spontano se distorguju duž vibracija koje nisu totalno simetrične, pri čemu dolazi do uklanjanja degeneracije uz sniženje energije. JT efekat je analiziran i izračunati su JT parametri za ciklopentadienil radikal ( $C_5H_5^*$ ), benzen katjon ( $C_6H_6^+$ ) i benzen anjon ( $C_6H_6^-$ ), anjone i katjone koranulena i koronena ( $C_{20}H_{10}^-$ ,  $C_{20}H_{10}^+$ ,  $C_{24}H_{12}^-$  i  $C_{24}H_{12}^+$ ), anjonski magnezijum ftalocijanin (MgPc) i mangan(II) ftalocijanin (MnPc) primenom teorije funkcionala gustine. Izvedena je analiza uticaja većeg broja vibracija odgovornih za distorziju molekula primenom modela Svojestvenog puta distorzije. Sve potrebne informacije pri izračunavanju koeficijenata vibronske sprege sadržane su u strukturi minimalne energije koja predstavlja pravi minimum na površini potencijalne energije, pa je vibraciona analiza jednoznačna. Ovim modelom moguće je direktno odvojiti doprinose različitih vibracija JT distorziji, njihov energetski doprinos JT stabilizacionoj energiji duž puta distorzije i odrediti sile odgovorne za JT distorziju, dajući bolji uvid u poreklo i mehanizam vibronske sprege.

**Analysis of the Jahn-Teller effect in organic and inorganic systems**

Ljubica D. Andjelković, Matija S. Zlatar, Maja A. Gruden\*

*Department of Chemistry, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia, \*Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia*

The Jahn-Teller (JT) theorem states that a molecule with a degenerate electronic state spontaneously distorts along a non-totally symmetric vibrational coordinates. This removes the degeneracy and lowers the energy. The JT effect was analysed and the JT parameters were determined for cyclopentadienyl radical ( $C_5H_5^*$ ), benzene cation ( $C_6H_6^+$ ), benzene anion ( $C_6H_6^-$ ), anions and cations of corannulene and coronene ( $C_{20}H_{10}^-$ ,  $C_{20}H_{10}^+$ ,  $C_{24}H_{12}^-$  i  $C_{24}H_{12}^+$ ), anionic magnesium phthalocyanine (MgPc) and manganese(II) phthalocyanine (MnPc) by the means of Density Functional Theory (DFT) approach. The analysis of the multimode JT problem was performed by the means of the Intrinsic Distortion Path (IDP) model. All the required information, to calculate the vibronic coupling coefficients is contained in the minimum energy lower-symmetry structure. This structure is the real minimum on the potential energy surface, allowing normal mode analysis in the straightforward manner. With this model, it is possible to directly separate the contributions of the different normal modes to the JT distortion, their energy contributions to the JT stabilization energy along a relevant particular path of distortion and the forces responsible for the distortion, giving further insight into the origin and mechanism of the vibronic coupling.