

Srpsko hemijsko društvo



Serbian Chemical Society

**58. Savetovanje
Srpskog hemijskog društva**

**KRATKI IZVODI
RADOVA
KNJIGA RADOVA**

**58th Meeting of
the Serbian Chemical Society**

**Book of Abstracts
Proceedings**

**Beograd 9. i 10. jun 2022. godine
Belgrade, Serbia, June 9-10, 2022**

CIP - Katalogizacija u publikaciji - Narodna biblioteka Srbije, Beograd
54(082)
577.1(082)
66(082)
66.017/.018(082)
502/504(082)
СРПСКО хемијско друштво. Саветовање (58 ; 2022 ; Београд)
Kratki izvodi radova ; [i] Knjiga radova / 58. savetovanje Srpskog
hemijskog društva, Beograd 9. i 10. jun 2022. godine = Book of Abstracts
[end] Proceedings = 58th meeting of the Serbian Chemical Society, Belgrade,
June 9-10, 2022 ; [glavni i odgovorni urednik, editor Bogdan Šolaja]. -
Beograd : Srpsko hemijsko društvo = Serbian Chemical Society, 2022 (Beograd
: Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva TMF). - 226 str. :
ilustr. ; 25 cm
Radovi na srp. i engl. jeziku. - Tekst ćir. i lat. - Tiraž 30. -
Bibliografija uz pojedine radove.
ISBN 978-86-7132-079-5
a) Хемија - Зборници b) Биохемија - Зборници c) Технологија -
Зборници d) Наука о материјалима - Зборници e) Животна средина -
Зборници
COBISS.SR-ID 67900169

58. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA,
Beograd, 9. i 10. jun 2022.

KRATKI IZVODI RADOVA/KNJIGA RADOVA
58th MEETING OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY
Belgrade, Serbia, 9-10 June 2022
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

Bogdan Šolaja

Uređivački odbor/Editorial Board

**Ivana Ivančev-Tumbas, Suzana Jovanović-Šanta, Aleksandra Tubić, Melina
Kalagasidis Krušić**

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**

Godina izdanja: 2022.

Tiraž/ Circulation

30 primeraka/ 30 copies printing

ISBN 978-86-7132-079-5

Naučni odbor

Scientific Committee

Bogdan Šolaja, predsednik/chair

Biljana Abramović

Katarina Anđelković

Vladimir Beškoski

Marija Gavrović-Jankulović

Branimir Grgur

Maja Gruden

Miloš Đuran

Vladislava Jovanović

Branimir Jovančičević

Melina Kalagasidis Krušić

Zorica Knežević-Jugović

Dragana Milić

Vesna Mišković-Stanković

Igor Opsenica

Ivanka Popović

Mirjana Popsavin

Niko Radulović

Slavica Ražić

Snežana Stanković

Gordana Stojanović

Dragica Trivić

Gordana Ćirić-Marjanović

125



Organizacioni odbor

Organising Committee

Dušan Sladić, predsednik/chair

Vladimir Beškoski

Slađana Đorđević

Ivana Ivančev-Tumbas

Konstantin Ilijević

Suzana Jovanović-Šanta

Branimir Jovančičević

Melina Kalagasidis Krušić

Dragana Milić

Vesna Mišković-Stanković

Andrea Nikolić

Igor Opsenica

Sanja Panić

Snežana Rajković

Goran Roglić

Slađana Savić

Života Selaković

Jelena Trifković

Aleksandra Tubić

Vuk Filipović



Savetovanje je 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
četiri plenarna predavanja (PP),
dva predavanja dobitnika Medalje SHD (MP),
četiri predavanja po pozivu (PPP),
sto četrnaest saopštenja (obima jedna stranica) i
osam radova (obima od najmanje četiri stranice),
prihvaćenih za prezentovanje na
58. Savetovanju Srpskog hemijskog društva.

This book contains abstracts of
four plenary lectures (PP),
two lectures of SCS Medal awardees (MP),
four invited lectures (PPP),
one hundred and fourteen abstracts and
eight papers accepted for presentation at
the 58th 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



Magnetna anizotropija u pentagonalno bipiramidalnim kompleksima prve serije prelaznih metala

Filip Ž. Vlahović¹, Maja A. Gruden², Matija S. Zlatar³

¹ Inovacioni centar Hemijskog fakulteta, Studentski trg 12-16, 11000 Beograd, Srbija

² Univerzitet u Beogradu - Hemijski fakultet, Studentski trg 12-16, 11000 Beograd, Srbija

³ Univerzitet u Beogradu - IHTM, Njegoševa 12, 11000 Beograd, Srbija

U ovom radu prikazana je validaciona studija u cilju preciznog izračunavanja magnetne anizotropije primenom teorije funkcionala gustine (DFT). Analizirana su 26 sedmo-koordinovana visoko-spinska kompleksa prve serije prelaznih metala, upotrebom dve DFT metode (CP-DFT i LF-DFT), a dobijeni rezultati upoređeni sa eksperimentalnim. U potrazi za najtačnijim teorijskim opisom magnetne anizotropije, testirali smo različite tipove aproksimacija funkcionala gustine kako za izračunavanje precizne geometrije, tako i za tačan opis magnetne anizotropije.



Slika 1. Geometrija prve koordinacione sfere ispitivanih kompleksa

Magnetic anisotropy in pentagonal bipyramidal complexes of first-row transition metal ions

Filip Ž. Vlahović¹, Maja A. Gruden², Matija S. Zlatar³

¹ Innovative Centre, Faculty of Chemistry, Belgrade, Ltd., Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia

² University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia

³ University of Belgrade – ICTM, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia

We present a validation study that aims to accurately describe magnetic anisotropy using the density functional theory (DFT) approach. We have examined 26 seven-coordinate high-spin first-row transition metal complexes with two DFT methods (CP-DFT and LF-DFT) and compared the result with available experimental data. We have tested various DFT flavors in search of the best geometrical optimization conditions and the most accurate theoretical description of magnetic anisotropy.

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.