

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО**

**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**28<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**Abstracts**

Чачак – Ђаџак  
2023.

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ  
КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**Издавач:**

Српско кристалографско друштво,  
Ђушина 7, 11000 Београд,  
тел./факс: 2635-217

**За издавача:**

Тамара Тодоровић

**Уредник:**

Бождар Чобелјић

**Технички уредник:**

Предраг Ристић

Издавање ове публикације омогућено је  
финансијском помоћи Министарства  
науке, технолошког развоја и иновација  
Републике Србије

© Српско кристалографско друштво

ISBN 978-86-912959-6-7  
ISSN 0354-5741

Штампа:  
НАУЧНА КМД д.о.о.  
Гочка 9/8  
11000 Београд

Тираж: 50

Београд  
2023

**28<sup>th</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:**

Tamara Todorović

**Editor:**

Božidar Čobeljić

**Technical editor:**

Predrag Ristić

This publication is financially supported by  
The Ministry of Science, Technological  
Development and Innovation of the Republic of  
Serbia

© Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-6-7  
ISSN 0354-5741

Printing:  
NAUČNA KMD d.o.o.  
Gočka 9/8  
11000 Belgrade

Copies: 50

Belgrade  
2023



СРПСКО  
КРИСТАЛОГРАФСКО  
ДРУШТВО



SERBIAN  
CRYSTALLOGRAPHIC  
SOCIETY

## XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

## 28<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

### Научни одбор:

др Љиљана Карановић, РГФ, Београд  
др Катарина Анђелковић, ХФ, Београд  
др Оливера Клисурић, ПМФ, Нови Сад  
др Јелена Роган, ТМФ, Београд  
др Горан Богдановић, „ВИНЧА”, Београд  
др Мирјана Милић, „ВИНЧА”, Београд  
др Александар Кременовић, РГФ, Београд  
др Андријана Жекић, ФФ, Београд  
др Марко Родић, ПМФ, Нови Сад  
др Душан Вељковић, ХФ, Београд  
др Верица Јевтић, ПМФ, Крагујевац  
др Александра Дапчевић, ТМФ, Београд  
др Сабина Ковач, РГФ, Београд  
др Божидар Чобелић, ХФ, Београд  
др Маја Ђукић, ПМФ, Крагујевац  
др Душанка Радановић, ИХТМ, Београд  
др Предраг Дабић, РГФ, Београд  
др Тамара Тодоровић, ХФ, Београд  
др Наташа Јовић Орсини, „ВИНЧА”,  
Београд

### Организациони одбор:

Тамара Тодоровић, ХФ, Београд  
Божидар Чобелић, ХФ, Београд  
Катарина Анђелковић, ХФ, Београд  
Предраг Ристић, ХФ, Београд  
Мима Јевтовић, ИЦХФ, Београд  
Невена Стевановић, ХФ, Београд  
Драгана Митић, ИЦХФ, Београд  
Јована Арашков, ХФ, Београд  
Сања Коканов, ХФ, Београд  
Андреј Миливојац, ИЦХФ, Београд

### Scientific Committee:

Dr Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade  
Dr Katarina Anđelković, HF, Belgrade  
Dr Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad  
Dr Jelena Rogan, TMF, Belgrade  
Dr Goran Bogdanović, „VINČA”, Belgrade  
Dr Mirjana Milić, „VINČA”, Belgrade  
Dr Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade  
Dr Andrijana Žekić, FF, Belgrade  
Dr Marko Rodić, PMF, Novi Sad  
Dr Dušan Veljković, HF, Belgrade  
Dr Verica Jevtić, PMF, Kragujevac  
Dr Aleksandra Dapčević, TMF, Belgrade  
Dr Sabina Kovač, RGF, Belgrade  
Dr Božidar Čobeljić, HF, Belgrade  
Dr Maja Đukić, PMF, Kragujevac  
Dr Dušanka Radanović, IHTM, Belgrade  
Dr Predrag Dabić, RGF, Belgrade  
Dr Tamara Todorović, HF, Belgrade  
Dr Nataša Jović Orsini, „VINČA”, Belgrade

### Organizing Committee:

Tamara Todorović, HF, Belgrade  
Božidar Čobeljić, HF, Belgrade  
Katarina Anđelković, HF, Belgrade  
Predrag Ristić, HF, Belgrade  
Mima Jevtović, ICHF, Belgrade  
Nevena Stevanović, HF, Belgrade  
Dragana Mitić, ICHF, Belgrade  
Jovana Araškov, HF, Belgrade  
Sanja Kokanov, HF, Belgrade  
Andrej Milivojac, ICHF, Belgrade

## ОРГАНИЗАТОРИ / ORGANIZERS



СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY



УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ – ХЕМИЈСКИ  
ФАКУЛТЕТ  
UNIVERSITY OF BELGRADE – FACULTY OF  
CHEMISTRY

## СПОНЗОР / SPONSOR



МИНИСТАРСТВО НАУКЕ, ТЕХНОЛОШКОГ РАЗВОЈА  
И ИНОВАЦИЈА РЕПУБЛИКЕ СРБИЈЕ  
MINISTRY OF SCIENCE, TECHNOLOGICAL  
DEVELOPMENT AND INNOVATION OF THE REPUBLIC  
OF SERBIA

**ПЛЕНАРНА ПРЕДАВАЊА**

**PLENARY LECTURES**

## ХЕМИЈСКА ВЕЗА У КОМПЛЕКСИМА ПРЕЛАЗНИХ МЕТАЛА – СИНЕРГИЈА ЕКСПЕРИМЕНТА И ТЕОРИЈЕ

### М. Златар

Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију,  
Његошева 12, Београд, Србија  
e-mail: matija.zlatar@ihm.bg.ac.rs

Примарна амбиција модерне хемије је коришћење једног молекула за постизање жељене функције. Да би се ово остварило, неопходно је стећи фундаментално разумевање свих фактора који утичу на својства молекула [1]. Комбинација експерименталног одређивања кристалне структуре и рачунарске хемије је постала веома значајна за разумевање електронске структуре комплекса прелазних метала. У овом предавању биће представљени наши напори у разумевању и контроли метал-лиганд веза. Примери о којима ће бити речи укључују: уочавање различитих интра-и интер-молекулских интеракција присутних у кристалима [2]; природа везивања слабо координованих лиганата [2]; разумевање улоге кристалне воде [3]; координационе преференције лиганата [2,4]; улога централног металног јона и његовог спинског стања [5]; разлике у геометријама молекула у кристалима и у раствору [6].

[1] M. Zlatar, M. Gruden in *Practical Approaches to Biological Inorganic Chemistry*, 2nd Edition (2020) 17–67.

[2] T. Keškić, B. Čobeljić, M. Gruden, K. Anđelković, A. Pevec, I. Turel, D. Radanović, M. Zlatar M, *Cryst. Growth Des.*, **19** (2019) 4810–4821.

[3] T. Keškić, Z. Jagličić, A. Pevec, B. Čobeljić, D. Radanović, M. Gruden, I. Turel, K. Anđelković, I. Brčeski, M. Zlatar, *Polyhedron*, **191** (2020) 114802.

[4] D. Darmanović, D. Radanović, M. Jevtović, I. Turel, A. Pevec, M. Milčić, M. Gruden, M. Zlatar, N. Đorđević, K. Anđelković, B. Čobeljić, *J. Mol. Struct.*, **1266** (2022) 133509.

[5] M. Stojičkov, M. Zlatar, P. P. Mazzeo, A. Bacchi, D. Radanović, N. Stevanović, M. Jevtović, I. Novaković, K. Anđelković, D. Sladić, B. Čobeljić, M. Gruden, *Polyhedron*, **237** (2023) 116389.

[6] N. Stevanović, M. Zlatar, I. Novaković, A. Pevec, D. Radanović, I. Matic, M. Đorđić Crnogorac, T. Stanojković, M. Vujčić, M. Gruden, D. Sladić, K. Anđelković, I. Turel, B. Čobeljić, *Dalton Trans.*, **51** (2022) 185–196.

## CHEMICAL BONDING IN TRANSITION METAL COMPLEXES – SYNERGY BETWEEN EXPERIMENT AND THEORY

### M. Zlatar

University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Njegoševa  
12, Belgrade, Serbia

e-mail: matija.zlatar@ihm.bg.ac.rs

The primary ambition of modern chemistry is to utilize a single molecule to achieve the desired function. A fundamental understanding of all the factors affecting molecular properties is required to accomplish this [1]. Combining crystal structure determination and computational chemistry emerges as a powerful strategy for understanding the electronic structure of transition metal complexes. In this talk, our efforts in understanding and controlling metal-ligand bonding will be presented. Examples that will be discussed include: discerning different intra- and intermolecular interactions present in crystals [2]; the nature of binding of weakly coordinated ligands [2]; understanding the role of crystal water molecules [3]; coordination preferences of the ligands [2,4]; the role of central metal ion and its spin-state [5]; elucidating the difference in geometries in crystals and in solution [6].

[1] M. Zlatar, M. Gruden in *Practical Approaches to Biological Inorganic Chemistry*, 2nd Edition (2020) 17–67.

[2] T. Keškić, B. Čobeljić, M. Gruden, K. Anđelković, A. Pevec, I. Turel, D. Radanović, M. Zlatar, *Cryst. Growth Des.*, **19** (2019) 4810–4821.

[3] T. Keškić, Z. Jagličić, A. Pevec, B. Čobeljić, D. Radanović, M. Gruden, I. Turel, K. Anđelković, I. Brčeski, M. Zlatar, *Polyhedron*, **191** (2020) 114802.

[4] D. Darmanović, D. Radanović, M. Jevtović, I. Turel, A. Pevec, M. Milčić, M. Gruden, M. Zlatar, N. Đorđević, K. Anđelković, B. Čobeljić, *J. Mol. Struct.*, **1266** (2022) 133509.

[5] M. Stojičkoy, M. Zlatar, P. P. Mazzeo, A. Bacchi, D. Radanović, N. Stevanović, M. Jevtović, I. Novaković, K. Anđelković, D. Sladić, B. Čobeljić, M. Gruden, *Polyhedron*, **237** (2023) 116389.

[6] N. Stevanović, M. Zlatar, I. Novaković, A. Pevec, D. Radanović, I. Matić, M. Đorđić Crnogorac, T. Stanojković, M. Vujčić, M. Gruden, D. Sladić, K. Anđelković, I. Turel, B. Čobeljić, *Dalton Trans.*, **51** (2022) 185–196.

Acknowledgments: 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) and the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia, (451-03-47/2023-01/200026).