

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**28th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Чачак – Шаќак
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

**28th 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

28th 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



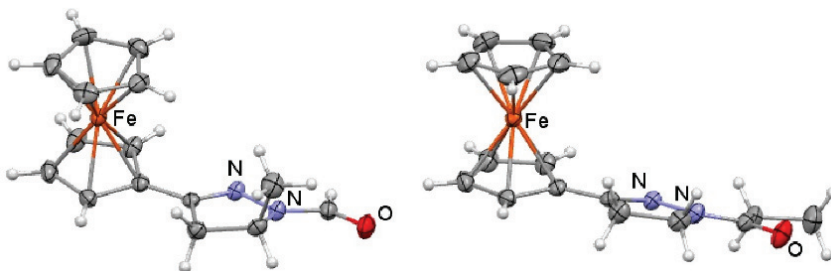
МИНИСТАРСТВО НАУКЕ, ТЕХНОЛОШКОГ РАЗВОЈА
И ИНОВАЦИЈА РЕПУБЛИКЕ СРБИЈЕ
MINISTRY OF SCIENCE, TECHNOLOGICAL
DEVELOPMENT AND INNOVATION OF THE REPUBLIC
OF SERBIA

МАЛЕ СТРУКТУРНЕ МОДИФИКАЦИЈЕ МОГУ ДОВЕСТИ ДО ПОТПУНО РАЗЛИЧИТИХ ИНТЕРМОЛЕКУЛСКИХ ИНТЕРАКЦИЈА: СЛУЧАЈ ФЕРОЦЕНИЛ *N*-АЦИЛ ПИРАЗОЛИНА

**Г. А. Богдановић^а, С. Б. Новаковић^а, З. Ратковић^б, С. Љ. Матић^в,
Ј. Мушкиња^в**

^а Лабораторија за теоријску физику и физику кондензоване материје, Институт за нуклеарне науке "Винча"- Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Београд, Србија; ^б Департман за хемију, Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, Радоја Домановића 12, Крагујевац, Србија; ^в Департман за науку, Институт за информационе технологије, Универзитет у Крагујевцу, Јована Цвијића бб, Крагујевац, Србија
e-mail: goranb@vin.bg.ac.rs

Серија нових фероценил-пиразолина је добијена у реакцији фероценил-халкона и њихових аналога, са хидразин-хидратом у присуству одговарајуће карбоксилне киселине. Структурна анализа монокристала *N*-формил, *N*-ацетил [1] и *N*-пропаноил деривата пиразолина указала је на интересантну способност ових једињења да формирају веома различите интермолекулске интеракције, упркос израженој структурној сличности. Међу 28 димера са енергијом стабилизације, $E_{\text{TOT}} < -15$ kJ/mol [2], формираних у ове четири кристалне структуре, ниједан димер није исти за било који пар структура. Такође, не постоји интеракција која је идентична по саставу за све четири структуре. Ови резултати указују на изузетну флексибилност фероценил *N*-ацил пиразолина у формирању интермолекулских интеракција. Једињења показују сличну антиоксидативну активност, упоредиву са кверцетином. Слична активност ових пиразолина се може објаснити њиховом прилагодљивошћу за различите интермолекулске интеракције.



[1] A. Burmuđžija, J. Muškinja, Z. Ratković, M. Kosanić, B. Ranković, S. B. Novaković, G. A. Bogdanović, *Inorg. Chim. Acta.*, **471** (2018) 570–576.

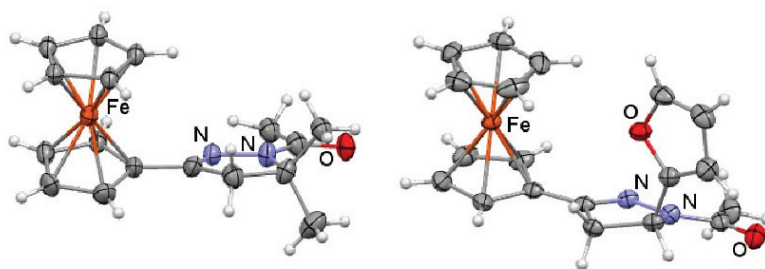
[2] P. R. Spackman, M. J. Turner, J. J. McKinnon, S. K. Wolff, D. J. Grimwood, D. Jayatilaka, M. A. Spackman, *J. Appl. Cryst.*, **54** (2021) 1006–1011.

SMALL STRUCTURAL MODIFICATIONS CAN RESULT IN COMPLETELY DIFFERENT INTERMOLECULAR INTERACTIONS: A CASE OF THE FERROCENYL *N*-ACYL PYRAZOLINES

G. A. Bogdanović^a, S. B. Novaković^a, Z. Ratković^b, S. Lj. Matić^c, J. Muškinja^c

^a Laboratory of Theoretical Physics and Condensed Matter Physics, Vinča Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; ^b Department of Chemistry, Faculty of Sciences, University of Kragujevac, Radoja Domanovića 12, Kragujevac, Serbia; ^c Department of Sciences, Institute for Information Technologies, University of Kragujevac, Jovana Cvijića bb, Kragujevac, Serbia
e-mail: goranb@vin.bg.ac.rs

The series of new ferrocenyl pyrazolines have been synthesized by the reaction of ferrocenyl chalcones and their analogues with hydrazine hydrate in the presence of corresponding carboxylic acid. Single-crystal X-ray crystallographic analysis of *N*-formyl, *N*-acetyl [1] and *N*-propanoyl pyrazoline derivatives revealed interesting ability of these compounds to form very different intermolecular interactions, despite their pronounced structural similarity. Amongst 28 dimers formed in four crystal structures with the stabilization energy $E_{\text{tot}} < -15$ kJ/mol [2], not a single dimer is the same for any pair of structures. Also, there is no interaction which is identical in composition for all four structures. These findings demonstrate the exceptional flexibility of ferrocenyl *N*-acyl pyrazolines in formation of intermolecular interactions. The compounds show similar antioxidant activity, comparable to quercetin. The similar activity of these pyrazolines can be explained by their flexibility for different intermolecular interactions.



[1] A. Burmudžija, J. Muškinja, Z. Ratković, M. Kosanić, B. Ranković, S. B. Novaković, G. A. Bogdanović, *Inorg. Chim. Acta.*, **471** (2018) 570–576.

[2] P. R. Spackman, M. J. Turner, J. J. McKinnon, S. K. Wolff, D. J. Grimwood, D. Jayatilaka, M. A. Spackman, *J. Appl. Cryst.*, **54** (2021) 1006–1011.