

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 - Каталогизacija у публикацији - Народна библиотека Србије, Београд
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

Magnetno indukovane gustine struja u singuletnim i tripletnim disk-klasterima bora

Sladana Đorđević¹, Miquel Solà², Slavko Radenković¹

¹ Univerzitet u Kragujevcu, Prirodno-matematički fakultet, Kragujevac, Srbija

² Univerzitet u Ğironi, Institut za kompjutersku hemiju i katalizu i Departman za hemiju, Ğirona, Katalonija, Španija

Struktura klasteri bora ĉija geometrija podseća na disk duĝe vreme fasciniraju i privlaĉe paĝnju hemiĉara. Raspodela molekulskih orbitala u ovim sistemima se moĝe opisati jednostavnim modelom „ĉestice u prstenu“. Po ovom modelu molekulske orbitale se javljaju u degenerisanim parovima, sa izuzetkom za $m = 0$ (bez angularne ĉvorne površine). Magnetno indukovane gustine struje su pokazale da disk-klasteri bora sa konfiguracijom zatvorene ljuske u svom osnovnom singuletnom stanju pokazuju aromatiĉni karakter. Nađeno je da disk klasteri bora koji su aromatiĉni u singuletnom stanju zadrĝavaju aromatiĉni karakter i u tripletnom stanju, kada im se oduzmu ili dodaju dva elektrona. Aromatiĉnost disk klastera bora u njihovim singletnim i tripletnim stanjima, sa izuzetkom tripletnog ${}^3B_{19}^-$, moĝe se uspešno predvideti pomoću Hückelovog i Bairdovog pravila.

Magnetically induced current densities in singlet and triplet disk-like boron clusters

Sladana Đorđević¹, Miquel Solà², Slavko Radenković¹

¹ University of Kragujevac, Faculty of Science, Kragujevac, Serbia

² University of Girona, Institute of Computational Chemistry and Catalysis and Department of Chemistry, Girona, Catalonia, Spain

The disk-like boron clusters are among the most alluring boron cluster forms. Molecular orbital distribution in these clusters can be rationalized by means of the simple particle-on-a-disk model. In this model, the molecular orbitals come by pairs except for $m = 0$ (no angular nodes). The calculated magnetically induced current densities revealed that the disk-like boron clusters in their singlet ground state with closed-shell configuration are aromatic. It was found that the disk-like boron clusters that are aromatic in their ground states remain aromatic in their lowest-lying triplet states when the number of valence electrons is increased or reduced by two electrons. In addition, if the lowest-lying triplet state in disk-like boron clusters is aromatic, this triplet state is the ground state for these species. Aromaticity of the studied disk-like boron clusters in their lowest-lying singlet and triplet state, with the exception of triplet ${}^3B_{19}^-$ can be predicted based on Hückel and Baird's rules.

Acknowledgment: This work was supported by the Serbian Ministry of Education, Science and Technological Development, Serbia (Agreement No. 451-03-68/2022-14/200122).