

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**XXIV КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**24th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

**Вршац – Vršac
2017.**

**XXIV КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ
КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

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

За издавача:
Снежана Зарић

Уредник:
Снежана Зарић

Технички уредник:
Снежана Зарић
Весна Медаковић

уз помоћ:
Душан Вељковић
Душан Маленов
Предраг Вулић

Издавање ове публикације омогућено је
финансијском помоћи Покрајинског
секретаријата за високо образовање и
научно-истраживачку делатност АП
Војводине

© Српско кристалографско друштво

ISBN 978-86-912959-3-6

Штампа:
САЈНОС д.о.о.
Момчила Тапавице 2
21000 Нови Сад

Тираж: 100

Нови Сад
2017

**24th 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:
Snežana Zarić

Editor:
Snežana Zarić

Technical editor:
Snežana Zarić
Vesna Medaković

with the help of:
Dušan Veljković
Dušan Malenov
Predrag Vulić

This publication is financially supported by
the Provincial Secretariat for Higher Education
and Scientific Research of AP Vojvodina

© Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-3-6

Printing:
SAJNOS d.o.o.
Momčila Tapavice 2
21000 Novi Sad

Copies: 100

Novi Sad
2017



СРПСКО
КРИСТАЛОГРАФСКО
ДРУШТВО



SERBIAN
CRYSTALLOGRAPHIC
SOCIETY

XXIV КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

24th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Научни одбор:

Др Снежана Зарић, ХФ, Београд
Др Дејан Полети, ТМФ, Београд
Др Љиљана Карановић, РГФ, Београд
Др Оливера Клисурић, ПМФ, Нови Сад
Др Јелена Роган, ТМФ, Београд
Др Братислав Антић, „ВИНЧА”, Београд
Др Срећко Трифуновић, ПМФ, Крагујевац
Др Александар Кременовић, РГФ, Београд
Др Предраг Вулић, РГФ, Београд
Др Горан Богдановић, „ВИНЧА”, Београд
Др Слађана Новаковић, „ВИНЧА”, Београд
Др Агнеш Капор, ПМФ, Нови Сад
Др Срђан Ракић, ПМФ, Нови Сад

Scientific Committee:

Dr. Snežana Zarić, HF, Belgrade
Dr. Dejan Poleti, TMF, Belgrade
Dr. Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade
Dr. Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad
Dr. Jelena Rogan, TMF, Belgrade
Dr. Bratislav Antić, “VINČA”, Belgrade
Dr. Srećko Trifunović, PMF, Kragujevac
Dr. Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade
Dr. Predrag Vulić, RGF, Belgrade
Dr. Goran Bogdanović, “VINČA”, Belgrade
Dr. Slađana Novaković, “VINČA”, Belgrade
Dr. Agneš Kapor, PMF, Novi Sad
Dr. Srđan Rakić, PMF, Novi Sad

Организациони одбор:

Весна Медаковић, ХФ, Београд
Снежана Зарић, ХФ, Београд
Душан Вељковић, ХФ, Београд
Оливера Клисурић, ПМФ, Нови Сад
Марко Родић, ПМФ Нови Сад
Јелена Андрић, ИЦХФ Београд
Ивана Станковић, ИХТМ, Београд
Душан Маленов, ХФ, Београд
Ивана Антонијевић, ИХТМ, Београд

Organizing Committee:

Vesna Medaković, HF, Belgrade
Snežana Zarić, HF, Belgrade
Dušan Veljković, HF, Belgrade
Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad
Marko Rodić, PMF, Novi Sad
Jelena Andrić, ICFC, Belgrade
Ivana Stanković, ICTM, Belgrade
Dušan Malenov, HF, Belgrade
Ivana Antonijević, ICTM, Belgrade

Усмена саопштења – Oral Presentations

<u>O. R. Klisurić, N. R. Filipović, A. S. Malešević, T. R. Todorović</u> METAL-ORGANSKE UMREŽENE STRUKTURE SREBRA(I) SA POTENCIJALNIM ANTIMIKROBNIM SVOJSTVIMA	16
<u>O. R. Klisurić, N. R. Filipović, A. S. Malešević, T. R. Todorović</u> SILVER(I)-BASED METAL-ORGANIC FRAMEWORKS WITH POTENTIAL ANTIMICROBIAL PROPERTIES	17
<u>D. V. Milojkov, V. Đ. Stanić, G. V. Janjić, D. R. Mutavdžić, B. J. Nastasijević, A. S. Radosavljević-Mihajlović, M. Milanović</u> NANOČESTICE Pr ³⁺ DOPIRANIH FLUORAPATITA DOBIJENIH KOPRECIPITACIONOM METODOM	18
<u>D. V. Milojkov, V. Đ. Stanić, G. V. Janjić, D. R. Mutavdžić, B. J. Nastasijević, A. S. Radosavljević-Mihajlović, M. Milanović</u> PR ³⁺ DOPED FLUORAPATITE NANOPARTICLES OBTAINED BY CO- PRECIPITATION METHOD	19
<u>Д. Б. Нинковић, Д. П. Маленов, П. В. Петровић, Е. Н. Brothers, S. Niu, М. В. Hall, М. Р. Белић, С. Д. Зарић</u> НЕОЧЕКИВАН ЗНАЧАЈ АРОМАТИЧНО-АЛИФАТИЧНИХ ИНТЕРАКЦИЈА И ИНТЕРАКЦИЈА КОСТУРА ПРОТЕИНА У СТАБИЛНОСТИ АМИЛОИДА	20
<u>D. B. Ninković, D. P. Malenov, P. V. Petrović, E. N. Brothers, S. Niu, M. B. Hall, M. R. Belić, S. D. Zarić</u> UNEXPECTED ROLE OF AROMATIC-ALIPHATIC AND PROTEIN BACKBONE INTERACTIONS IN THE STABILITY OF AMYLOIDS	21
<u>Ж. Милановић, Д. Миленковић, З. Марковић</u> КОМПАРАТИВНА СТУДИЈА АНТИОКСИДАТИВНЕ АКТИВНОСТИ ТРИХИДРОКСИПИРИДИНА И ПИРОГАЛОЛА	22
<u>Ž. Milanović, D. Milenković, Z. Marković</u> COMPARATIVE STUDY OF ANTIOXIDANT ACTIVITIES OF TRIHYDROXYPYRIDINES AND PYROGALLOL	23
<u>D. P. Malenov, D. Ž. Veljković, M. B. Hall, E. N. Brothers, S. D. Zarić</u> STEKING INTERAKCIJE BIS(DITIOLENA) NIKLA	24
<u>D. P. Malenov, D. Ž. Veljković, M. B. Hall, E. N. Brothers, S. D. Zarić</u> STEKING INTERAKCIJE BIS(DITIOLENA) NIKLA	25

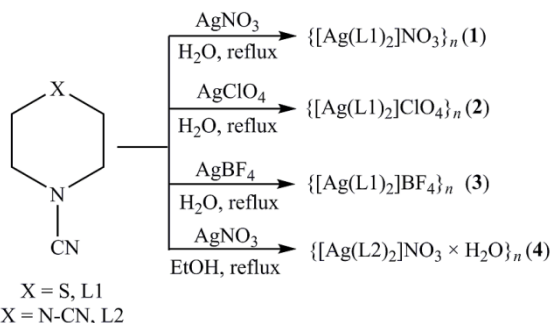
METAL-ORGANSKE UMREŽENE STRUKTURE SREBRA(I) SA POTENCIJALNIM ANTIMIKROBNIM SVOJSTVIMA

O. R. Klisurić^a, N. R. Filipović^b, A. S. Malešević^c, T. R. Todorović^c

^a *Departman za fiziku, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu, Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad, Srbija;* ^b *Poljoprivredni fakultet Univerzitet u Beogradu, Nemanjina 6, Beograd-Zemun, Srbija;* ^c *Hemijski fakultet, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 12-16, Beograd, Srbija;*
e-mail: olivera.klisuric@df.uns.ac.rs

Jedan od glavnih svetskih problema u javnom zdravlju predstavlja pojava novih otpornih sojeva mikroba. Stoga je potreba za novim antimikrobnim agensima pravi izazov. Metal-organske umrežene strukture (*engl.* metal-organic frameworks, MOFs) se mogu smatrati obećavajućim antimikrobnim agensima stoga što njihove neorganske i organske komponente mogu da obezbede platformu za visoku antimikrobnu aktivnost. Tokom proteklih godina, nova jedinjenja srebra, uključujući i nove materijale, su se pokazala kao snažni antimikrobni agensi [1]. Uzimajući ovo u obzir, sintetisana su četiri nova

MOF-a srebra(I) sa derivatima tiomorfolina i piperazina (Shema 1) koji su okarakterisani rendgenskom strukturnom analizom. Antimikrobna aktivnost je određena na osam bakterijskih sojeva i tri soja gljivica. Kompleks **4** je pokazao dobru antimikrobnu aktivnost na svim testiranim sojevima mikroorganizama.



Shema 1. Pojednostavljen prikaz sinteze MOF-ova.

Odabrani kristalografski podaci i detalji utučnjavanja:

1: $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{AgN}_4\text{S}$, tetragonalni sistem, $P-42_1m$, $a = 13,1512(5) \text{ \AA}$, $c = 4,3773(3) \text{ \AA}$, $V = 757,07(8) \text{ \AA}^3$, $Z = 2$, $\mu = 1,59 \text{ mm}^{-1}$. Finalni R faktor je 3,3% za 837 nezavisnih refleksija i 48 parametara. Zbog neodređenosti položaja nitratni jon je uklonjen iz strukturnog modela uz pomoć SQUEEZE proračuna.

2: $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{AgBF}_4\text{N}_4\text{S}_2$, tetragonalni sistem, $P-42_1m$, $a = 13,1613(6) \text{ \AA}$, $c = 4,4326(6) \text{ \AA}$, $V = 767,81(13) \text{ \AA}^3$, $Z = 2$, $\mu = 13,49 \text{ mm}^{-1}$. Finalni R faktor je 3,6% za 799 nezavisnih refleksija i 58 parametara.

3: $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{AgClN}_4\text{O}_4\text{S}_2$, tetragonalni sistem, $P-42_1m$, $a = 13,1198(3) \text{ \AA}$, $c = 4,6860(2) \text{ \AA}$, $V = 806,60(5) \text{ \AA}^3$, $Z = 2$, $\mu = 14,18 \text{ mm}^{-1}$. Finalni R faktor je 2,7% za 710 nezavisnih refleksija i 59 parametara.

4: $\text{C}_{12}\text{H}_{18}\text{AgN}_9\text{O}_4$, triklični sistem, $P-1$, $a = 6,6706(4) \text{ \AA}$, $b = 10,5894(9) \text{ \AA}$, $c = 13,5484(11) \text{ \AA}$, $\alpha = 91,104(7)^\circ$, $\beta = 99,965(5)^\circ$, $\gamma = 103,416(6)^\circ$, $V = 915,10(12) \text{ \AA}^3$, $Z = 2$, $\mu = 1,14 \text{ mm}^{-1}$. Finalni R faktor je 5,6% za 4118 nezavisnih refleksija i 243 parametara.

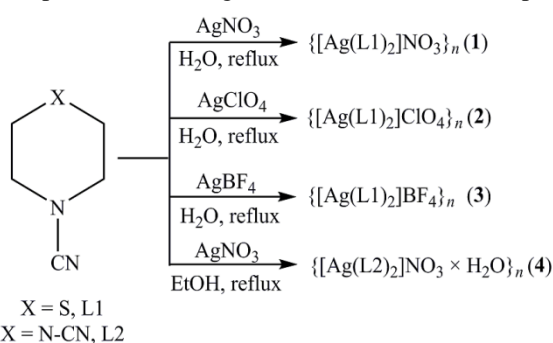
[1] Mathieu Berchel et al. *New J.Chem.*, **35** (2011) 1000–1003.

SILVER(I)-BASED METAL-ORGANIC FRAMEWORKS WITH POTENTIAL ANTIMICROBIAL PROPERTIES

O. R. Klisurić^a, N. R. Filipović^b, A. S. Malešević^c, T. R. Todorović^c

^a Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad, Serbia; ^b Faculty of Agriculture, University of Belgrade, Nemanjina 6, Belgrade–Zemun, Serbia; ^c Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia
e-mail: olivera.klisuric@df.uns.ac.rs

Resistant microbial strains are continuously emerging which is one of the major worldwide public health concerns. The need for new antimicrobial agents is a real challenge. Metal-organic frameworks (MOFs) can be considered as promising antimicrobial materials because their inorganic and organic components can provide platforms to generate high potent antimicrobial activity. Over recent years, new silver compounds, including new materials, have been proposed as potent antimicrobial agents



[1]. Taking this into account, four new silver-based MOFs were synthesized (Scheme 1), using thiomorpholine and piperazine derivatives as ligands, and characterized by X-ray diffraction analysis. The antimicrobial activity was evaluated on eight bacterial and three fungi strains. Complex 4 has good antimicrobial activity on all studied microorganisms.

Scheme 1. Simplified representation of MOFs syntheses.

Selected crystallographic data and refinement details:

1: $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{AgN}_4\text{S}$, tetragonal system, $P-42_1m$, $a = 13.1512(5)$ Å, $c = 4.3773(3)$ Å, $V = 757.07(8)$ Å³, $Z = 2$, $\mu = 1.59$ mm⁻¹. The final R factor is 3.3% for 837 independent reflections and 48 parameters. A SQUEEZE calculation removed the nitrate anion from the structure model for its disorder.

2: $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{AgBF}_4\text{N}_4\text{S}_2$, tetragonal system, $P-42_1m$, $a = 13.1613(6)$ Å, $c = 4.4326(6)$ Å, $V = 767.81(13)$ Å³, $Z = 2$, $\mu = 13.49$ mm⁻¹. The final R factor is 3.6% for 799 independent reflections and 58 parameters.

3: $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{AgClN}_4\text{O}_4\text{S}_2$, tetragonal system, $P-42_1m$, $a = 13.1198(3)$ Å, $c = 4.6860(2)$ Å, $V = 806.60(5)$ Å³, $Z = 2$, $\mu = 14.18$ mm⁻¹. The final R factor is 2.7% for 710 independent reflections and 59 parameters.

4: $\text{C}_{12}\text{H}_{18}\text{AgN}_9\text{O}_4$, triclinic system, $P-1$, $a = 6.6706(4)$ Å, $b = 10.5894(9)$ Å, $c = 13.5484(11)$ Å, $\alpha = 91.104(7)^\circ$, $\beta = 99.965(5)^\circ$, $\gamma = 103.416(6)^\circ$, $V = 915.10(12)$ Å³, $Z = 2$, $\mu = 1.14$ mm⁻¹. The final R factor is 5.6% for 4118 independent reflections and 243 parameters.

[1] Mathieu Berchel et al. *New J.Chem.*, **35** (2011) 1000–1003.