

**Nastavno-naučnom veću Hemijskog fakulteta
Univerziteta u Beogradu**

Molim Nastavno-naučno veće Hemijskog fakulteta da mi odobri prijavu teme doktorske disertacije pod nazivom „Sinteza i karakterizacija pseudohalogenidnih kompleksa Co(II), Ni(II), Zn(II) i Cd(II) sa kondenzacionim proizvodom 2-hinolinkarboksaldehida i Žirarovog T reagensa“

Obrazloženje teme:

1. Naučna oblast: Neorganska hemija

2. Predmet naučnog istraživanja

Ispitivanja u okviru ove doktorske disertacije obuhvataju ispitivanja koordinacionih svojstava kondenzacionog proizvoda 2-hinolinkarboksaldehida i Žirarovog T reagensa kroz sintezu i potpunu strukturnu karakterizaciju njegovih kompleksa sa jonima d-metala (Co(II), Ni(II), Zn(II) i Cd(II)) i različitim pseudohalogenidima (N_3^- , NCO^-). Novosintetisani kompleksi Ni(II) i Co(II) bili bi podvrgnuti detaljnoj analizi magnetnih svojstava.

3. Osnovne hipoteze

Istraživanja polinuklearnih kompleksa d-metala premošćenih azidima predmet su sve većeg broja studija poslednjih decenija. Razlog su interesantna strukturna, magnetna i spektroskopska svojstva. Azido mostovi u kompleksima posreduju u različitim interakcijama magnetne izmene među metalnim jonima, čiji intenzitet i tip zavise od rastojanja između metalnih jona, diedarskog ugla između ravni koje sadrže metalne jone i od dužina metal-ligand veza. Azid se takođe može koordinovati i kao monodentat. Ambidentatni cijanat se može koordinovati preko azota ili kiseonika kao monodentatni ili mosni ligand. U literaturi je poznat veliki broj dinuklearnih kompleksa Ni(II), Cu(II) i Mn(II) premošćenih azidom, ali ne i istih kompleksa sa Co(II), verovatno zbog teškog dobijanja monokristala i oksidacije do Co(III). Budući da azid deluje kao inhibitor više enzima, studije o kompleksima ovog tipa zanimljive su i sa biološkog aspekta. Iz

navedenih razloga deo ovog istraživanja baziraće se na sintezi kondenzacionog proizvoda 2-hinolinkarboksaldehida i Žirarovog T reagensa i proučavanju njegove mogućnosti koordinacije za Co(II), Ni(II), Zn(II) i Cd(II). Ligand koji je kvaternarna amonijumova so imao bi tri potencijalna mesta za koordinaciju, hinolinski i azometinski azot i karbonilni kiseonik. Iz razloga što pokazuje keto-enolnu tautomeriju, može postojati u protonovanom i deprotonovanom, tj. cviter-jonskom obliku i u oba slučaja koordinovati jone metala. U ovoj doktorskoj disertaciji plan je sintetisati i potpuno okarakterisati dva dinuklearna kompleksa Ni(II) i Co(II) premošćena azidom, sintetisati mononuklearne komplekse Zn(II), Cd(II) i Co(II), koji bi kao monodentate imali azide ili cijanate. DFT proračuni mogu pružiti dobre rezultate i pretpostaviti magnetna svojstva premošćenih end-to-end ($\mu_{1,3}$ -N₃) i end-on ($\mu_{1,1}$ -N₃) dinuklearnih kompleksa, nakon čega bi se ti rezultati potvrdili eksperimentalno, magnetnim merenjima.

4. Cilj istraživanja i očekivani rezultati

Cilj istraživanja bio bi:

- Sinteza liganda, (E)-*N,N,N* trimetil-2-okso-2-(2-(hinolin-2-ilmetilen)hidrazinil)etan-1-amonijum hlorida, kao i njegovih kompleksa sa Ni(II), Co(II), Zn(II) i Cd(II) i različitim pseudohalogenidima (N₃⁻, NCO⁻)
- Strukturna karakterizacija sintetisanih jedinjenja
- Ispitivanje magnetnih svojstava kompleksa Ni(II) i Co(II)
- Ispitivanje biološke aktivnosti sintetisanih jedinjenja
- DFT proračuni

5. Metode istraživanja

Za karakterizaciju dobijenih jedinjenja bila bi primenjena elementalna analiza, IR spektroskopija, (¹H; ¹³C) NMR spektroskopija. Kompleksi dobijeni u obliku monokristala bili bi okarakterisani primenom rendgenske strukturne analize. Za komplekse Ni(II) i Co(II) detaljniji uvid u strukturu dala bi magnetna merenja, a strukture kompleksa Zn(II) i Cd(II) u rastvoru bile bi određene NMR spektroskopijom. Dobijeni podaci dali bi uvid u molekulsku strukturu ovih jedinjenja, kako u čvrstom stanju, tako i u rastvoru. Za detaljniju karakterizaciju biće urađeni i DFT proračuni. Magnetna merenja će se obaviti pomoću MPMS XL-5 SQUID magnetomera.

5. Spisak stručne literature koja će se koristiti

Literatura će tokom rada biti proširena u skladu sa potrebama istraživanja.

- L.D. Popov, A.N. Morozov, I.N. Shcherbakov, Yu.P. Tupolova, V.V. Lukov, V.A. Kogan, *Russ. Chem. Rev.* **2009**, 78, 643.
- A. Escuer, G. Aromí, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2006**, 4721.

3. J. Ribas, A. Escuer, M. Monfort, R. Vicente, R. Corteś, L. Lezama, T. Rojo, *Coord. Chem. Rev.* **1999**, 193-195, 1027.
4. S.S. Massoud, F.R. Louka, Y.K. Obaid, R. Vicente, J. Ribas, Roland C. Fischer, F.A. Mautner. *Dalton Trans.* **2013**, 42, 3968.
5. Lj.S. Vojinović-Ješić, G.A. Bogdanović, V.M. Leovac, V.I. Češljević, Lj.S. Jovanović, *Struct. Chem.* **2008**, 19, 807.
6. F. F. de Biani, E. Ruiz, J. Cano, J. J. Novoa, S. Alvarez, *Inorg. Chem.* **2000**, 39, 3221.
7. L.-Y. Wang, B. Zhao, C.-X. Zhang, D.-Z. Liao, Z.-H. Jiang, S.-P. Yan, *Inorg. Chem.* **2003**, 42, 5804.
8. M. G. Sommer, R. Marx, D. Schweinfurth, Y. Rechkemmer, P. Neugebauer, M. van der Meer, S. Hohloch, S. Demeshko, F. Meyer, J. van Slageren, B. Sarkar, *Inorg. Chem.* **2017**, 56, 402.
9. S.-Q. Bai, E.-Q. Gao, Z. He, C.-J. Fang, C.-H. Yan, *New J. Chem.* **2005**, 29, 935.
10. J. Yuan, W.-B. Shi, H.-Z. Kou, *Transition Met. Chem.* **2015**, 40, 807.

Mentor:

dr Katarina Anđelković, redovni profesor Hemijskog fakulteta Univerziteta u Beogradu

Predlažem sledeći sastav komisije

dr Milica R. Milenković, docent Hemijskog fakulteta Univerziteta u Beogradu

dr Božidar Čobeljić, docent Hemijskog fakulteta Univerziteta u Beogradu

dr Dušanka Radanović, naučni savetnik Naučne ustanove Instituta za hemiju, tehnologiju i metalurgiju-Centar za hemiju, institut od nacionalnog značaja, Univerzitet u Beogradu

U Beogradu, 23.10.2018.

Podnosilac molbe:
Mima Č. Romanović
master hemičar
istraživač pripravnik
