

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

XXVI КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

26th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Abstracts

Сребрно језеро – Silver Lake
2019.

XXVI КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

26th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Abstracts

Издавач - Publisher:

– Српско кристалографско друштво

Ђушина 7, 11000 Београд, Србија, тел. 011-3336-701

– Serbian Crystallographic Society

Đušina 7, 11 000 Belgrade, Serbia, phone: +381 11 3336 701

За издавача – For the publisher:

Јелена Роган – Jelena Rogan

Уредник – Editor:

Александра Дапчевић – Aleksandra Dapčević

Технички уредник – Technical editor:

Лидија Радовановић – Lidija Radovanović

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

The publication is financially supported by Ministry of Education, Science and Technological development, Republic of Serbia

© Српско кристалографско друштво – Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-5-0

ISSN 0354-5741

Штампа – Printing:

Технолошко-металуршки факултет, Развојно-истраживачки центар Графичког инжењерства, Карнегијева 4, Београд, Србија

Faculty of Technology and Metallurgy, Research and Development Centre of Printing Technology, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

Тираж – Copies: 100

Београд – Belgrade

2019.

**XXVI КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**26th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:

др Љиљана Карановић, РГФ Београд / dr Ljiljana Karanović, RGF Beograd
др Оливера Клисурић, ПМФ Нови Сад / dr Olivera Klisurić, PMF Novi Sad
др Марко Родић, ПМФ Нови Сад / dr Marko Rodić, PMF Novi Sad
др Срећко Трифуновић, ПМФ Крагујевац / dr Srećko Trifunović, PMF Kragujevac
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, TMF Beograd
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА” / dr Goran Bogdanović, INN "Vinča"
др Наташа Јовић-Орсини, ИНН „ВИНЧА” / dr Nataša Jović-Orsini, INN "Vinča"
др Снежана Зарић, ХФ Београд / dr Snežana Zarić, HF Beograd
др Катарина Анђелковић, ХФ Београд / dr Katarina Anđelković, HF Beograd
др Братислав Антић, ИНН „ВИНЧА” / dr Bratislav Antić, INN "Vinča"
др Мирјана Милић, ИНН „ВИНЧА” / dr Mirjana Milić, INN "Vinča"
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, TMF Beograd
др Предраг Вулић, РГФ Београд / dr Predrag Vulić, RGF Beograd
др Тамара Тодоровић, ХФ Београд / dr Tamara Todorović, HF Beograd
др Слађана Новаковић, ИНН „ВИНЧА” / dr Slađana Novaković, INN "Vinča"
др Сабина Ковач, РГФ Београд / dr Sabina Kovač, RGF Beograd
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, RGF Beograd

ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZATION COMMITTEE:

др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, RGF Beograd
др Предраг Вулић, РГФ Београд / dr Predrag Vulić, RGF Beograd
др Сабина Ковач, РГФ Београд / dr Sabina Kovač, RGF Beograd
маст. геол. Предраг Дабић, РГФ Београд / Predrag Dabić, RGF Beograd
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, TMF Beograd
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, TMF Beograd
др Лидија Радовановић, ИЦ ТМФ Београд / dr Lidiја Radovanović, IC TMF Beograd
Војана Симовић, дипл. инж, ИМСИ Београд / Voјana Simović, IMSI Beograd

ULOGA NEKOVALENTNIH INTERAKCIJA FLUORA U PAKOVANJU MOTIVA: ANALIZA KRISTALOGRAFSKIH PODATAKA I KVANTNO-HEMIJSKI PRORAČUNI

**I. Đorđević^a, G. Janjić^a, A. Lazić^b, K. Gak^b, N. Valentić^c, N. Trišović^c,
L. Radovanović^b, J. Rogan^c**

^a Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerzitet u Beogradu, Njegoševa 12, Beograd, Srbija; ^b Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija; ^c Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija
e-mail: ivana.djordjevic@chem.bg.ac.rs

Nekovalentne interakcije imaju značajnu ulogu u formiranju supramolekulskog kristalnog pakovanja molekula. Interakcije koje uključuju atome halogena obezbeđuju slabo, ali visoko usmerenu kontrolu pakovanja molekula u čvrstom stanju. Uvođenje F-atoma može dovesti do značajnih promena u 2D ili 3D strukturama [1], povećanja stabilnosti biomolekula [2] ili poboljšanja dizajna lekova [3]. Da bi se ispitalo efekat supstitucije H-atoma F-atomom, sintetisana su i strukturno okarakterisana dva derivata hidantoina: C₁₅H₁₆N₂O₃ (**1**) i C₁₅H₁₅N₂O₃F (**2**) (slika).

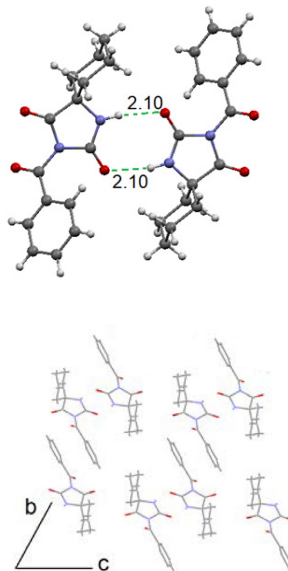
Analiza kristalnih pakovanja **1** i **2** pokazala je da su NH[⋯]O i CH[⋯]O vodonične veze najbrojnije. U strukturi **2** se zbog fluorovanja povećava broj interakcija cikloheksilnog (Ch) i fenil-grupe (Ph) prstena (CH[⋯]π interakcije), kao i između dva Ph prstena (π-π interakcije). Kvantno-hemijski proračuni na model sistemima koji predstavljaju dimere derivata hidantoina i izolovanih cikličnih jedinjenja, pokazali su da fluorovanje utiče na stvaranje jačih CH[⋯]π i π-π interakcija. Atom F u **2** učestvuje u formiranju tri CH[⋯]F i jedne F[⋯]F interakcije, što je u saglasnosti sa rezultatima Kembridžke baze podataka, koji su pokazali da su najbrojnije CH[⋯]F i F[⋯]F interakcije, a njihova jačina dostiže vrednost 2 kcal·mol⁻¹.

Kristalogafski podaci: **1**, *P*-1, *a* = 6,3079(13), *b* = 10,573(2), *c* = 11,415(2) Å, α = 67,21(3), β = 78,84(3), γ = 76,16(3)°, *R*₁ = 6,06%; **2**, *P*-1, *a* = 5,9981(12), *b* = 11,148(2), *c* = 12,073(2) Å, α = 108,98(3), β = 101,57(3), γ = 105,27(3)°, *R*₁ = 4,82%.

[1] T. Friščić, D.G. Reid, G.M. Day, M.J. Duer, W. Jones, *Cryst. Growth Des.*, **11** (2011) 972–981.

[2] A.R. Voth, P. Khuu, K. Oishi, P.S. Ho, *Nat Chem.*, **1** (2009) 74–79.

[3] S. G. DiMagno, H. Sun, *Curr. Top. Med. Chem.*, **6** (2006) 1473–1482.



**THE ROLE OF NON-COVALENT FLUORINE INTERACTIONS
IN PACKING MOTIFS: CRYSTALLOGRAPHIC DATA
ANALYSIS AND QUANTUM CHEMICAL CALCULATIONS**

**I. Đorđević^a, G. Janjić^a, A. Lazić^b, K. Gak^b, N. Valentić^c, N. Trišović^c,
L. Radovanović^b, J. Rogan^c**

^a Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia; ^b Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia; ^c Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia
e-mail: ivana.djordjevic@chem.bg.ac.rs

Non-covalent interactions have a significant role in supramolecular crystal packings of the molecules. Halogen interactions provide weak but highly directed control of the packing of molecules in the solid state. Introduction of F atom can lead to significant differences in 2D or 3D structures [1], higher structural stability of biomolecules [2] or improve drug design [3]. In order to examine the substitution effect of H atom with F atom, two hydantoin derivatives were synthesized and structurally characterized: C₁₅H₁₆N₂O₃ (**1**) i C₁₅H₁₅N₂O₃F (**2**) (Figure).

Crystallographic analysis of **1** and **2** showed that NH[⋯]O and CH[⋯]O hydrogen bonds are the most numerous in their crystal packings. Due to fluoridation in **2**, the number of interactions among cyclohexyl (Ch) and phenyl ring (Ph) rings (CH[⋯]π interactions), as well as among two Ph rings (π-π interactions) is increased. Quantum-chemical calculations on the model systems presented by dimmers of hydantoin derivatives and isolated cyclic compounds, verified that fluoridation caused the formation of stronger CH[⋯]π and π-π interactions. The F atom in **2** is involved in three CH[⋯]F and one F[⋯]F interactions, which is in agreement with the results from the Cambridge Structural Database, which have shown that CH[⋯]F and F[⋯]F interactions are the most numerous, and their strength reaches the value of 2 kcal·mol⁻¹.

Crystallographic data: **1**, *P*-1, *a* = 6.3079(13), *b* = 10.573(2), *c* = 11.415(2) Å, α = 67.21(3), β = 78.84(3), γ = 76.16(3)°, *R*₁ = 6.06%; **2**, *P*-1, *a* = 5.9981(12), *b* = 11.148(2), *c* = 12.073(2) Å, α = 108.98(3), β = 101.57(3), γ = 105.27(3)°, *R*₁ = 4.82%.

[1] T. Friščić, D.G. Reid, G.M. Day, M.J. Duer, W. Jones, *Cryst. Growth Des.*, **11** (2011) 972–981.

[2] A.R. Voth, P. Khuu, K. Oishi, P.S. Ho, *Nat Chem.*, **1** (2009) 74–79.

[3] S.G. DiMagno, H. Sun, *Curr. Top. Med. Chem.*, **6** (2006) 1473–1482.

