

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:

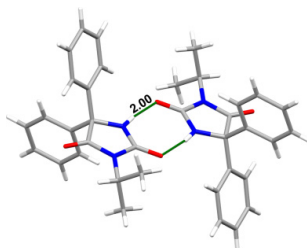
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, RGF Beograd
др Предраг Вулић, РГФ Београд / dr Predrag Vulić, RGF Beograd
др Сабина Ковач, РГФ Београд / dr Sabina Kovač, RGF Beograd
маст. геол. Предраг Дабић, РГФ Београд / Predrag Dabić, RGF Beograd
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr 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

**УЛОГА МЕЃУМОЛЕКУЛСКИХ ИНТЕРАКЦИЈА У
КРИСТАЛНОМ ПАКОВАЊУ 3-ИЗОПРОПИЛ И
3-ЦИКЛОПРОПИЛ ДЕРИВАТА ФЕНИТОИНА**

Н. Тришовић^a, Л. Радовановић^b, Г. В. Јањић^c, С. Т. Јелић^d, Ј. Роган^a

^a Технолошко–металуришки факултет, Универзитет у Београду, Карнегијева 4, 11000 Београд, Србија; ^b Иновациони центар Технолошко–металуришког факултета, Карнегијева 4, 11000 Београд, Србија; ^c Институт за хемију, технологију и металургију, Универзитет у Београду, Његошева 12, 11000 Београд; ^d Институт за мултидисциплинарна истраживања, Универзитет у Београду, Кнеза Вишеслава 1, 11000 Београд, Србија
e-mail: ntrisovic@tmf.bg.ac.rs

Синтетисана су два деривата фенитоина (5,5-дифенилхидантоина) и одређене су њихове кристалне структуре. Урађена је квантитативна анализа кристалног паковања са аспекта међумолекулских интеракција и структурних мотива. Кристално паковање 3-изопропил-5,5-дифенилхидантоина садржи центросиметричне димере повезане паром N–H···O водоничних веза који се даље умрежавају помоћу C–H···O интеракција и паралелних интеракција између фенолних прстенова на великом растојању у ланце паралелне *c*-оси (слика 1). Основна карактеристика кристалне структуре 3-циклопропил-5,5-дифенилхидантоина јесу ланци који настају преко N–H···O водоничних веза, C–H···O и C–H···π интеракција (слика 2). Представљено истраживање даје увид у улогу међумолекулских интеракција у кристалном паковању проучаваних једињења, као и даље смернице за дизајнирање нових деривата фенитоина са побољшаним фармацеутским својствима.



Слика 1. Центросиметрични $R_2^2(8)$ прстен 3-изопропил-5,5-дифенилхидантоина.

Структурни подаци 3-изопропил-5,5-дифенилхидантоина: $C_{18}H_{18}N_2O_2$, триклиничан систем, просторна група $P-1$, $a = 8,5357(9)$, $b = 8,6225(8)$, $c = 12,3979(9)$ Å, $\alpha = 104,010(7)$, $\beta = 91,826(7)$, $\gamma = 115,201(10)$ °, $V = 791,54(14)$ Å³, $R_1 = 0,0473$.

Структурни подаци 3-циклопропил-5,5-дифенилхидантоина: $C_{18}H_{16}N_2O_2$, моноклиничан систем, просторна група $P2_1/c$, $a = 11,5996(5)$, $b = 10,6459(3)$, $c = 12,2992(5)$ Å, $\beta = 101,977(4)$ °, $V = 1485,74(10)$ Å³, $R_1 = 0,0403$.

**THE ROLE OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN THE
CRYSTAL PACKING OF 3-ISOPROPYL AND 3-CYCLOPROPYL
DERIVATIVES OF PHENYTOIN**

N. Trišović^a, L. Radovanović^b, G. V. Janjić^c, S. T. Jelić^d, J. Rogan^a

^a Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia; ^b Innovation Center of the Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia; ^c Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; ^d Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Kneza Višeslava 1, 11000 Belgrade, Serbia

e-mail: ntrisovic@tmf.bg.ac.rs

Two derivatives of phenytoin (5,5-diphenylhydantoin) were synthesized and their crystal structures were determined. The quantitative analysis of the crystal packings in terms of the contributing intermolecular interactions and structural motifs has been done. The crystal packing of 3-isopropyl-5,5-diphenylhydantoin contains centrosymmetric dimers linked by paired N–H···O hydrogen bonds which further self-organize through pairs of C–H···O interactions and a parallel interaction of two phenyl rings at a large offset into chains running along the *c*-axis (Figure 1). The principal feature of the crystal structure of 3-cyclopropyl-5,5-diphenylhydantoin is formation of the chains by N–H···O hydrogen bonds, C–H···O and C–H··· π interactions (Figure 2). The presented investigation provide not only new insight into the role of intermolecular interactions in the crystal packing, but also guidance for furthering crystal engineering to design novel hydantoin derivatives with improved pharmaceutical properties.

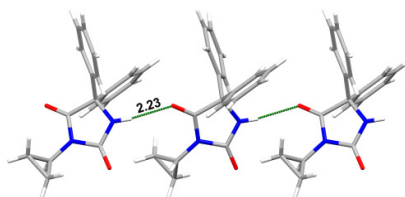


Figure 2. Supramolecular chain of 3-cyclopropyl-5,5-diphenylhydantoin along the *c*-axis.

Crystal data for 3-isopropyl-5,5-diphenylhydantoin: C₁₈H₁₈N₂O₂, triclinic, *P*-1, *a* = 8.5357(9), *b* = 8.6225(8), *c* = 12.3979(9) Å, α = 104.010(7), β = 91.826(7), γ = 115.201(10)°, *V* = 791.54(14) Å³, *R*₁ = 0.0473.

Crystal data for 3-cyclopropyl-5,5-diphenylhydantoin: C₁₈H₁₆N₂O₂, monoclinic, *P*2₁/*c*, *a* = 11.5996(5), *b* = 10.6459(3), *c* = 12.2992(5) Å, β = 101.977(4)°, *V* = 1485.74(10) Å³, *R*₁ = 0.0403.