

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО**  
**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА**  
**СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**27<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE**  
**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**Abstracts**

**Крагујевац – Kragujevac**  
**2021.**

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**  
**Изводи радова**

**27<sup>th</sup> 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:**

Марија Станић – Marija Stanić

**Уредник – Editor:**

Верица Јевтић – Verica Jevtić

**Технички уредник – Technical editor:**

Маја Ђукић – Maja Đukić

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 978-86-6009-085-2  
ISSN 0354-5741

**Штампа – Printing:**

Природно-математички факултет, Радоја Домановића 12, Крагујевац, Србија  
Faculty of Science, Radoje Domanović 12, Kragujevac, Serbia

Тираж – Copies: 50  
Крагујевац – Kragujevac  
2021.

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**27<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:**

др Љиљана Карановић, РГФ Београд / dr Ljiljana Karanović, FMG Belgrade  
др Тамара Тодоровић, ХФ Београд / dr Tamara Todorović, FC Belgrade  
др Марко Родић, ПМФ Нови Сад / dr Marko Rodić, FS Novi Sad  
др Душан Велковић, ХФ Београд / dr Dušan Veljković, FC Belgrade  
др Оливера Клисурић, ПМФ Нови Сад / dr Olivera Klisurić, FS Novi Sad  
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, FTM Belgrade  
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА” / dr Goran Bogdanović, INS "Vinča"  
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, FMG Belgrade  
др Братислав Антић, ИНН „ВИНЧА” / dr Bratislav Antić, INN "Vinča"  
др Снежана Зарић, ХФ Београд / dr Snežana Zarić, FC Belgrade  
др Катарина Анђелковић, ХФ Београд / dr Katarina Anđelković, FC Belgrade  
др Срђан Ракић, ПМФ Нови Сад / dr Srđan Rakić, FS Novi Sad  
др Наташа Јовић Орсини, ИНН „ВИНЧА” / dr Nataša Jović Orsini, INS "Vinča"  
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, FTM Belgrade

**ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZATION COMMITTEE:**

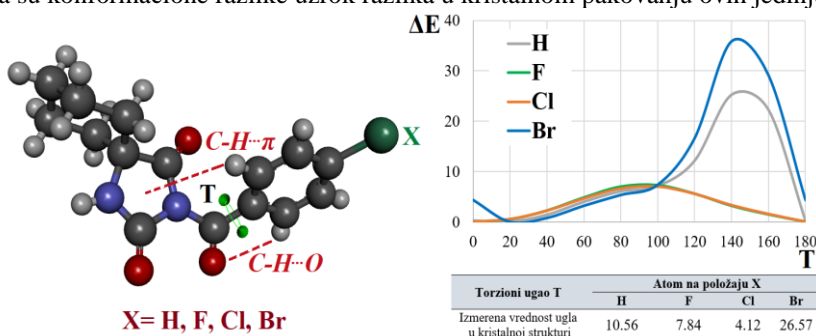
др Верица Јевтић, ПМФ Крагујевац / dr Verica Jevtić, FS Kragujevac  
др Гордана Радић, ФМН Крагујевац / dr Gordana Radić, FMS Kragujevac  
др Аница Глођовић, ПМФ Крагујевац / dr Anica Glidović, FS Kragujevac  
др Андрија Ћирић, ПМФ Крагујевац / dr Andrija Ćirić, FS Kragujevac  
др Марина Ћендић Серафиновић, ПМФ Крагујевац / dr Marina Ćendić Serafinović, FS Kragujevac  
др Марија Ристић, ПМФ Крагујевац / dr Marija Ristić, FS Kragujevac  
др Емина Мркалић, ИИТ Крагујевац / dr Emina Mrkalić, ИТ Кragujevac  
др Данијела Стојковић, ИИТ Крагујевац / dr Danijela Stojković, ИТ Кragujevac  
др Едина Авдовић, ИИТ Крагујевац / dr Edina Avdović, ИТ Кragujevac  
др Маја Ђукић, ПМФ Крагујевац / dr Маја Đukić, FS Kragujevac  
Сандра Јовичић Милић, ПМФ Крагујевац / Sandra Jovičić Milić, FS Kragujevac  
Ђорђе Петровић, ПМФ Крагујевац / Đorđe Petrović, FS Kragujevac  
Маријана Касаловић, ПМФ Крагујевац / Marijana Kasalović, FS Kragujevac  
Марко Радовановић, ПМФ Крагујевац / Marko Radovanović, FS Kragujevac  
Игњат Филиповић, ПМФ Крагујевац / Ignjat Filipović, FS Kragujevac

## UTICAJ HALOGENOVANJA AROMATIČNOG PRSTENA NA KONFORMACIJU SPIROHIDANTOINSKIH JEDINJENJA

G. Janjić,<sup>a</sup> I. Đorđević,<sup>a</sup> A. Lazić,<sup>b</sup> L. Radovanović,<sup>b</sup> M. Petković-Benazzouz,<sup>c</sup> J. Rogan,<sup>d</sup> N. Trišović,<sup>d</sup>

<sup>a</sup> Univerzitet u Beogradu, Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Institut od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju, Beograd, Srbija; <sup>b</sup> Inovacioni Centar Tehnološko-Metalurškog Fakulteta, Beograd, Srbija; <sup>c</sup> Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija; <sup>d</sup> Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Srbija  
e-mail: goran.janjic@ihm.bg.ac.rs

Kristalografska i kvantnohemijska studija, koja je usmerena na proučavanje efekata fluorovanja benzoil-grupe vezane za cikloheksan-5-spirohiantoin, pokazala je da aromatični prsten ima najveći afinitet prema cikloheksanskom prstenu (nepolarnim grupama), sa kojim gradi C–H $\cdots\pi$  i paralelne interakcije sa velikim pomakom. Uvođenje atoma fluora na aromatični prsten dovodi do povećanog afiniteta, usled stvaranja dodatnih C–H $\cdots$ F interakcija [1]. Dodatno, ova studija je proširena na hlorovane i bromovane derivate. Analizom kristalnog pakovanja četiri derivata spirohidantoina (slika) pokazano je da orijentacija aromatičnog prstena, koja je preko rotabilne C(aromatični)–C(karbonilni) veze odvojena od rigidnog spirohidantoinskog jezgra, određuje trodimenzionalnu supramolekulsku arhitekturu. Energijski profil rotabilne veze (slika) jako zavisi od vrste halogenog atoma vezanog za aromatični prsten (X). Najvišu barijeru (najmanju rotacionu slobodu) ima aromatični prsten sa Br atomom (oko 36 kcal/mol), dok najnižu barijeru imaju prstenovi sa vezanim Cl ili F atomom (oko 7 kcal/mol). Izmerene vrednosti torzionog ugla T (slika) u kristalnim stukturama, koji definiše rotabilnost ove veze, odgovaraju minimumima energije na energijskim profilima. Kod ovih orijentacija aromatični prstenovi istovremeno grade C–H $\cdots\pi$  interakcije sa hidantoinским prstenom i C–H $\cdots$ O interakciju sa karbonilnom grupom koja premošćuje dva prstena. Na osnovu ovih rezultata može se zaključiti da su orijentacije aromatičnog prstena određene unutarmolekulskim interakcijama, a ne međumolekulskim interakcijama, kao i da su konformacione razlike uzrok razlika u kristalnom pakovanju ovih jedinjenja.



[1] K. Gak Simić, I. Đorđević, A. Lazić, L. Radovanović, M. Petković-Benazzouz, J. Rogan, N. Trišović, G. Janjić, *CrystEngComm*, **23** (2021) 2606–2622.

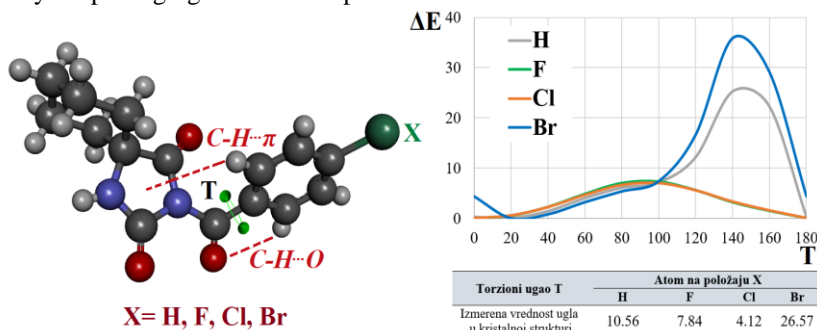
## INFLUENCE OF HALOGENATION OF AROMATIC RING ON THE CONFORMATION OF SPIROHYDANTOIN COMPOUNDS

G. Janjić,<sup>a</sup> I. Đorđević,<sup>a</sup> A. Lazić,<sup>b</sup> L. Radovanović,<sup>b</sup> M. Petković-Benazzouz,<sup>c</sup> J. Rogan,<sup>d</sup> N. Trišović,<sup>d</sup>

<sup>a</sup> Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> Faculty of Physics, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; <sup>d</sup> Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia  
e-mail: goran.janjic@ihtm.bg.ac.rs

The crystallographic and quantum chemical study, focused on the effects of fluorination of the benzoyl group bound to the spirohydantoin moiety, showed that the aromatic ring has the highest affinity towards the cyclohexene ring (nonpolar groups), thus forming C–H $\cdots\pi$  and parallel interactions at large offset. Introduction of a fluorine atom into the aromatic ring leads to higher affinity, due to formation of additional C–H $\cdots$ F interactions [1].

Subsequently, the present study has been extended to chlorinated and brominated derivatives. An analysis of the crystal packaging of four spirohydantoin derivatives (Figure) has shown that the orientation of the aromatic ring, bound to the rigid spirohydantoin moiety by the rotatable C(aromatic)–C(carbonyl) bond, determines the three-dimensional supramolecular architecture. The energy profile of the rotatable bond (Figure) strongly depends on the halogen atom bound to the aromatic ring (X). The highest barrier (the lowest rotational freedom) has been found for the aromatic ring with the Br atom (36 kcal/mol), while the rings with the Cl or F atom have the lowest barrier (7 kcal/mol). The measured values of the torsion angle T in the crystal structures (Figure), which defines the rotability of the mentioned bond, correspond to the energy minima on the energy profiles. In these orientations, the aromatic ring simultaneously forms C–H $\cdots\pi$  interactions with the hydantoin ring and C–H $\cdots$ O interaction with the carbonyl spacer group. Based on these results, one can conclude that the orientation of the aromatic ring is defined by intramolecular interactions, not by intermolecular interactions, as well as that the conformational differences further cause differences in the crystal packaging of these compounds.



[1] K. Gak Simić, I. Đorđević, A. Lazić, L. Radovanović, M. Petković-Benazzouz, Jelena Rogan, N. Trišović, G. Janjić, *CrystEngComm*, **23** (2021) 2606–2622.