

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**28th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Чачак – Шаќак
2023.

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ
КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

Издавач:

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

За издавача:

Тамара Тодоровић

Уредник:

Бождар Чобелјић

Технички уредник:

Предраг Ристић

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

© Српско кристалографско друштво

ISBN 978-86-912959-6-7

ISSN 0354-5741

Штампа:

НАУЧНА КМД д.о.о.

Гочка 9/8

11000 Београд

Тираж: 50

Београд

2023

**28th 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:

Tamara Todorović

Editor:

Božidar Čobeljić

Technical editor:

Predrag Ristić

This publication is financially supported by
The Ministry of Science, Technological
Development and Innovation of the Republic of
Serbia

© Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-6-7

ISSN 0354-5741

Printing:

NAUČNA KMD d.o.o.

Gočka 9/8

11000 Belgrade

Copies: 50

Belgrade

2023



СРПСКО
КРИСТАЛОГРАФСКО
ДРУШТВО



SERBIAN
CRYSTALLOGRAPHIC
SOCIETY

XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

28th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Научни одбор:

др Љиљана Карановић, РГФ, Београд
др Катарина Анђелковић, ХФ, Београд
др Оливера Клисурић, ПМФ, Нови Сад
др Јелена Роган, ТМФ, Београд
др Горан Богдановић, „ВИНЧА”, Београд
др Мирјана Милић, „ВИНЧА”, Београд
др Александар Кременовић, РГФ, Београд
др Андријана Жекић, ФФ, Београд
др Марко Родић, ПМФ, Нови Сад
др Душан Вељковић, ХФ, Београд
др Верица Јевтић, ПМФ, Крагујевац
др Александра Дапчевић, ТМФ, Београд
др Сабина Ковач, РГФ, Београд
др Божидар Чобелић, ХФ, Београд
др Маја Ђукић, ПМФ, Крагујевац
др Душанка Радановић, ИХТМ, Београд
др Предраг Дабић, РГФ, Београд
др Тамара Тодоровић, ХФ, Београд
др Наташа Јовић Орсини, „ВИНЧА”,
Београд

Организациони одбор:

Тамара Тодоровић, ХФ, Београд
Божидар Чобелић, ХФ, Београд
Катарина Анђелковић, ХФ, Београд
Предраг Ристић, ХФ, Београд
Мима Јевтовић, ИЦХФ, Београд
Невена Стевановић, ХФ, Београд
Драгана Митић, ИЦХФ, Београд
Јована Арашков, ХФ, Београд
Сања Коканов, ХФ, Београд
Андреј Миливојац, ИЦХФ, Београд

Scientific Committee:

Dr Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade
Dr Katarina Anđelković, HF, Belgrade
Dr Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad
Dr Jelena Rogan, TMF, Belgrade
Dr Goran Bogdanović, „VINČA”, Belgrade
Dr Mirjana Milić, „VINČA”, Belgrade
Dr Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade
Dr Andrijana Žekić, FF, Belgrade
Dr Marko Rodić, PMF, Novi Sad
Dr Dušan Veljković, HF, Belgrade
Dr Verica Jevtić, PMF, Kragujevac
Dr Aleksandra Dapčević, TMF, Belgrade
Dr Sabina Kovač, RGF, Belgrade
Dr Božidar Čobeljić, HF, Belgrade
Dr Maja Đukić, PMF, Kragujevac
Dr Dušanka Radanović, IHTM, Belgrade
Dr Predrag Dabić, RGF, Belgrade
Dr Tamara Todorović, HF, Belgrade
Dr Nataša Jović Orsini, „VINČA”, Belgrade

Organizing Committee:

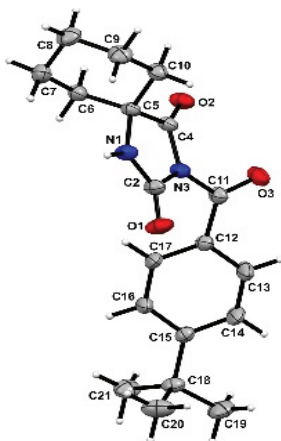
Tamara Todorović, HF, Belgrade
Božidar Čobeljić, HF, Belgrade
Katarina Anđelković, HF, Belgrade
Predrag Ristić, HF, Belgrade
Mima Jevtović, ICHF, Belgrade
Nevena Stevanović, HF, Belgrade
Dragana Mitić, ICHF, Belgrade
Jovana Araškov, HF, Belgrade
Sanja Kokanov, HF, Belgrade
Andrej Milivojac, ICHF, Belgrade

**УЛОГА СТРУКТУРНИХ МОТИВА У ИЗГРАДЊИ
СУПРАМОЛЕКУЛСКЕ АРХИТЕКТУРЕ
3-(4-*TERC*-БУТИЛБЕНЗОИЛ)-1,3-
-ДИАЗАСПИРО[4.5]ДЕКАН-2,4-ДИОНА**

**А. Лaziћ^а, Л. Радовановић^а, Ј. Роган^б, Г. Јањић^в, И. Ђорђевић^в,
Н. Тришовић^б**

^а Универзитет у Београду, Иновациони центар Технолошко-металуришког факултета, Београд, Србија; ^б Универзитет у Београду, Технолошко-металуришки факултет, Београд, Србија; ^в Универзитет у Београду-Институт за хемију, технологију и металургију, Институт од националног значаја за Републику Србију, Београд, Србија
e-mail: ntrisovic@tmf.bg.ac.rs

Проучавано једињење (слика 1) синтетисано је полазећи од циклохексанона Бучерер-Бергсовом реакцијом и накнадним ациловањем добијеног спирохидантоина. Изградња кристалне структуре овог једињења проучавана је са аспекта доприноса једноставних димерних мотива који се успостављају преко различитих интермолекулских интеракција.



Слика 1 ORTEP приказ
једињења.
Figure 1 ORTEP drawing
of the compound.

Интермолекулске интеракције додатно су проучаване помоћу Хиршфелдових површина и 2Д графичких приказа отисака интеракција. Кристална структура, наиме, задржава мотив који се често среће код деривата хидантоина, у коме су два инверзано оријентисана молекула повезана паром N—H···O водоничних веза. Овај мотив формира два типа двоструких ланаца, који даље граде слој (слика 2). Осим тога, слабе C—H···O интеракције заједно са дисперзионим интеракцијама (π - π и хидрофобне интеракције) идентификоване су у овој кристалној структури.

Кристалнографски подаци: C₁₉H₂₄N₂O₃,
M_r = 328,4, триклиничан систем, просторна група *P*-1,
a = 6,2810(2), *b* = 12,0586(4), *c* = 12,1852(5) Å,
 α = 77,624(3), β = 81,039(3), γ = 79,111(3) °,
V = 878.81(6) Å³, *Z* = 2, *F*(000) = 352, ρ_x = 1,380 g cm⁻³,
 $\mu(\text{MoK}\alpha)$ = 0,084 mm⁻¹. Утачњавање са *F*² (220 параметара) дало је *R*₁ = 0,0520, *wR*₂ = 0,1199, *S* = 1,033 за све податке и *R*₁ = 0,0443 за 3232 уочених рефлексија са *I* ≥ 2σ(*I*).

ROLE OF STRUCTURAL MOTIFS IN FORMATION OF THE SUPRAMOLECULAR ARCHITECTURE OF 3-(4-*TERT*-BUTYLBENZOYL)-1,3-DIAZASPIRO[4.5]DECANE-2,4-DIONE

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

^a University of Belgrade, Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia; ^b University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia; ^c University of Belgrade - Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, Belgrade, Serbia
e-mail: ntrisovic@tmf.bg.ac.rs

The title compound (Figure 1) was prepared from cyclohexanone in the Bucherer-Bergs reaction, followed by acylation of the obtained spirohydantoin. Formation of the crystal structure of this compound was analysed in terms of a number of simple dimeric motifs which are associated with different intermolecular interactions. The crystal structure retains the motif commonly found in hydantoin derivatives, where two molecules related by inversion are linked by a pair of N–H···O hydrogen bonds. This motif is involved in two types of double chains, which further form a layer (Figure 2). Intermolecular interactions were also investigated using Hirshfeld surface analysis and 2D fingerprint analysis. Weak C–H···O interactions together with the

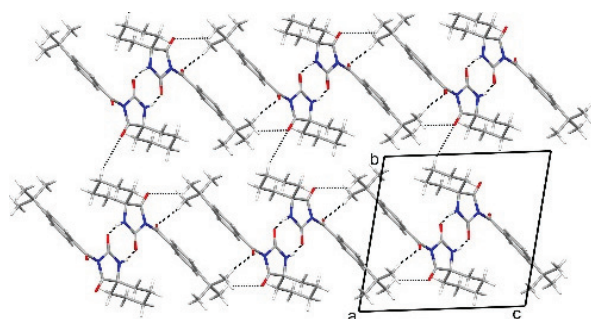


Figure 2 Formation of a layer within the crystal structure of the spirohydantoin derivative.

Слика 2 Формирање 2Д слоја у кристалној структури деривата спирохидантоина.

dispersion interactions (π - π and hydrophobic) as the source of attraction are identified in this crystal structure.

Crystal data: C₁₉H₂₄N₂O₃, $M_r = 328.4$, triclinic system, space group $P\bar{1}$, $a = 6.2810(2)$, $b = 12.0586(4)$, $c = 12.1852(5)$ Å, $\alpha = 77.624(3)^\circ$, $\beta = 81.039(3)^\circ$, $\gamma = 79.111(3)^\circ$, $V = 878.81(6)$ Å³, $Z = 2$, $F(000) = 352$, $\rho_x = 1.380$ g cm⁻³, $\mu(\text{MoK}\alpha) = 0.084$ mm⁻¹. The refinement on F^2 (220 parameters) yielded $R_1 = 0.0520$, $wR_2 = 0.1199$, $S = 1.033$ for all data, and $R_1 = 0.0443$ for 3232 observed reflections with $I \geq 2\sigma(I)$.