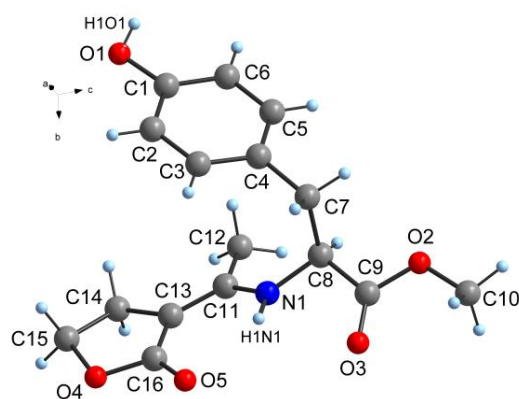


СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

XXII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА
Изводи радова

22nd CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Abstracts



Смедерево-Smederevo
2015

XXII КОНФЕРЕНЦИЈАСРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА
Изводи радова

22nd CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Abstracts

Издавач – Publisher:

Српско кристалографско друштво

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

Serbian Crystallographic Society

Đušina 7, 11000 Belgrade, Serbia, phone/fax: 381-11-2635-217

За издавача – For the publisher:

Срећко Трифуновић – Srećko Trifunović

Уредник – Editor:

Срећко Трифуновић – Srećko Trifunović

Технички уредник – Technical editor:

Верица Јевтић – Verica Jevtić

уз помоћ – with help of:

Данијела Стојковић – Danijela Stojković

Гордана Радић – Gordana Radić

Издавање ове публикације омогућено је финансијском помоћи Природно-
-математичког факултета, Универзитета у Крагујевцу.

This publication is financially supported by the Faculty of Science, University of
Kragujevac.

Српско кристалографско друштво – Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-2-9

Штампа – Printing

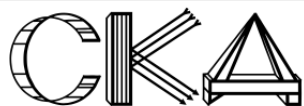
Копирница ДУГА

Крагујевац - Kragujevac

Тираж – Copies: 70

Крагујевац – Kragujevac

2015



SRPSKO KRISTALOGRAFSKO DRUŠTVO
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**XXII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**22nd CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Научни одбор – Scientific Committee:

др Дејан Полети, ТМФ, Београд - Dr. Dejan Poleti, TMF, Belgrade
др Јелена Роган, ТМФ, Београд - Dr. Jelena Rogan, TMF, Belgrade
др Љиљана Карановић, РГФ, Београд - Dr. Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade
др Александар Кременовић, РГФ, Београд - Dr. Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade
др Предраг Вулић, РГФ, Београд - Dr. Predrag Vulić, RGF, Belgrade
др Агнеш Капор, ПМФ, Нови Сад - Dr. Agneš Kapor, PMF, Novi Sad
др Срђан Ракић, ПМФ, Нови Сад - Dr. Srđan Rakić, PMF, Novi Sad
др Оливера Клисурећ, ПМФ, Нови Сад - Dr. Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad
др Снежана Зарић, ХФ, Београд - Dr. Snežana Zarić, HF, Belgrade
др Братислав Антић, ИНН „ВИНЧА”, Београд - Dr. Bratislav Antić, INN „VINČA”, Belgrade
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА”, Београд - Dr. Goran Bogdanović, INN „VINČA”, Belgrade
др Слађана Новаковић, ИНН „ВИНЧА”, Београд - Dr. Slađana Novaković, INN „VINČA”, Belgrade

Организациони одбор – Organizing Committee:

Срећко Трифуновић, ПМФ, Крагујевац – Srećko Trifunović, Faculty of Science, Kragujevac
Верица Јевтић, ПМФ, Крагујевац - Verica Jevtić, Faculty of Science, Kragujevac
Гордана Радић, Факултет Медицинских наука, Крагујевац – Gordana Radić, Faculty of Medical Sciences, Kragujevac
Данијела Стојковић, ПМФ, Крагујевац – Danijela Stojković, Faculty of Science, Kragujevac

SINTEZA, STRUKTURA I SVOJSTVA 3-BENZIL-CIKLOPENTANSPIRO-5-HIDANTOINA

A. Lazić^a, L. Radovanović^b, J. Rogan^a, G. Ušćumlić^a

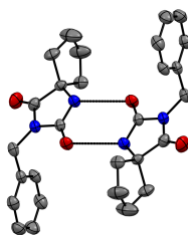
^aTehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija;

^bInovacioni Centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija;

e-mail: lazicanita@hotmail.com

Derivati hidantoina se uveliko primenjuju u medicini. Poznati su kao antikonvulzivi, antidepresivi i antikancerogeni agensi [1]. U okviru proučavanja uticaja strukture na biološku aktivnost derivata cikloalkanspiro-5-hidantoina, sintetisan je 3-benzil-cikloalkanspiro-5-hidantoin. Jedinjenje je dobijeno Bučerer-Libovom metodom polazeći od ciklopentanona, kalijum-cijanida i amonijum-karbonata u 50%-nom rastvoru etanola, posle čega je izvršena nukleofilna supstitucija benzil-bromidom. Monokristali odgovarajućih dimenzija dobijeni su prekrizacijom iz etil-acetata posle 24 h na sobnoj temperaturi. Jedinjenje je okarakterisano rendgenskom strukturnom analizom i UV-vis, FT-IR, ¹H i ¹³C NMR spektroskopskim metodama.

Asimetrična jedinica 3-benzil-ciklopentanspiro-5-hidantoina sastoji se od dva molekula, u kojima ciklopentanski prsten ima konformaciju koverta. Dve jake vodonične veze N–H...O između NH-grupa iz hidantoinskih prstenova jednog molekula i O=C-grupa iz hidantoinskih prstenova susednih molekula [$d(N\cdots O)$ iznose 2,869(4) i 2,913(4) Å; uglovi iznose 174 i 160 °], dovode do formiranja centrosimetričnih $R_2^2(8)$ dimera (slika). Dimeri su dalje povezani u 3D mrežu slabim C–H... π interakcijama između H-atoma u ciklopentanskom prstenu i benzenskog prstena (dužina H–Cg iznosi 2,960 Å).



Slika. Centrosimetrični $R_2^2(8)$ dimer

Kristalografski podaci: $C_{28}H_{32}N_4O_4$, $M_r = 488,58$, trikliničan sistem, prostorna grupa $P \bar{1}$, $a = 5,976(1)$, $b = 12,801(3)$, $c = 17,604(4)$ Å, $\alpha = 106,51(3)$, $\beta = 91,33(3)$, $\gamma = 92,01(3)$ °, $V = 1289,6(4)$ Å³, $R_1 = 0,0569$ za 2252 refleksija sa $I \geq 2\sigma(I)$.

[1] H. Merritt, T. Putnam, Arch NeurPsych. 39 (1938) 1003-1015; H. Byrtus, M. Pawlowski, A. Czopek, A. Bojanski, B. Duszyńska, G. Nowak, A. Klodzińska, E. Tatarczyńska, A. Wesolowska, E. Chojnacka-Wójcik, Eur. J. Med. Chem. 40 (2005) 820-829; N. Penthalá, T. Yerramreddy, P. Crooks, Bioorg. Med. Chem. 21 (2011) 1411-1413.

SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURE AND PROPERTIES OF 3-BENZYL-CYCLOPENTANESPIRO-5-HYDANTOIN

A. Lazić^a, L. Radovanović^b, J. Rogan^a, G. Ušćumlić^a

^aFaculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia; ^bInnovation Centre of Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

e-mail: lazicanita@hotmail.com

Hydantoin derivatives are widely used in medicine. They are known as anticonvulsants, antidepressants and anticancer agents [1]. Within the study of the hydantoins, a new 3-benzyl-cycloalkanespiro-5-hydantoin has been synthesized. Titled compound has been prepared using Bucherer-Lieb method starting from cyclopentanone, potassium cyanide and ammonium carbonate in 50 % ethanol solution, followed by nucleophilic substitution with benzyl bromide. The single crystals of the suitable size were formed by recrystallization from ethyl acetate after 24 h standing at room temperature. The characterization of the compound was made by the single-crystal X-ray diffraction analysis and UV-vis, FT-IR, ¹H and ¹³C NMR spectroscopic methods.

The asymmetric unit of the 3-benzyl-cyclopentane-5-hydantoin consists of two molecules, in which a cyclopentane rings adopt the envelope conformation. Molecules form R₂²(8) centrosymmetric dimers through two strong N–H...O hydrogen bonds between hydrogen bond donor NH group and hydrogen bond acceptor O=C group from hydantoin rings belonging to adjacent molecules [*d*(N...O) are 2.869(4) and 2.913(4) Å; angle values are 174 and 160 °] (Figure). By weak C–H...π interactions between H atoms of the cyclopentane and benzene rings (H–Cg distance is 2.960 Å), the dimers are further connected into the 3D network.

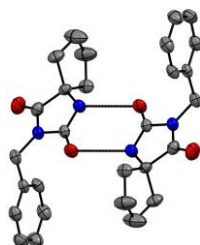


Figure. The centrosymmetric R₂²(8) dimer

Crystal data: C₂₈H₃₂N₄O₄, *M_r* = 488.58, triclinic, space group *P* $\bar{1}$, *a* = 5.976(1), *b* = 12.801(3), *c* = 17.604(4) Å, α = 106.51(3), β = 91.33(3), γ = 92.01(3) °, *V* = 1289.6(4) Å³, *R*₁ = 0.0569 for 2252 observed reflections with *I* ≥ 2σ(*I*).

[1] H. Merritt, T. Putnam, Arch NeurPsych. 39 (1938) 1003-1015; H. Byrtus, M. Pawlowski, A. Czopek, A. Bojanski, B. Duszyńska, G. Nowak, A. Klodzińska, E. Tatarczyńska, A. Wesolowska, E. Chojnacka-Wójcik, Eur. J. Med. Chem. 40 (2005) 820-829; N. Penthalá, T. Yerramreddy, P. Crooks, Bioorg. Med. Chem. 21 (2011) 1411-1413.