

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО**

**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**23<sup>rd</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**Abstracts**

Андревље – Andrevlje  
2016.

**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ  
КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

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

За издавача:  
Оливера Клисурић

Уредник:  
Оливера Клисурић

Технички уредник:  
Мирјана Радановић

уз помоћ:  
Марко Родић  
Љиљана Војиновић Јешић

Издавање ове публикације омогућено је  
финансијском помоћи Природно-мате-  
матичког факултета Универзитета у Но-  
вом Саду

© Српско кристалографско друштво

ISBN 978-86-912959-3-6

Штампа:  
Футура д.о.о.  
Мажуранићева 46  
21131 Петроварадин

Тираж: 100

Нови Сад  
2016

**23<sup>rd</sup> 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:  
Olivera Klisurić

Editor:  
Olivera Klisurić

Technical editor:  
Mirjana Radanović

with the help of:  
Marko Rodić  
Ljiljana Vojinović Ješić

This publication is financially supported by  
the Faculty of Sciences University of Novi Sad

© Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-3-6

Printing:  
Futura d.o.o.  
Mažuranićeva 46  
21131 Petrovaradin

Copies: 100

Novi Sad  
2016

CIP - Каталогизација у публикацији  
Библиотека Матице српске, Нови Сад

548/549(048.3)

**СРПСКО кристалографско друштво. Конференција (23 ; 2016 ; АндРЕВЉЕ)**

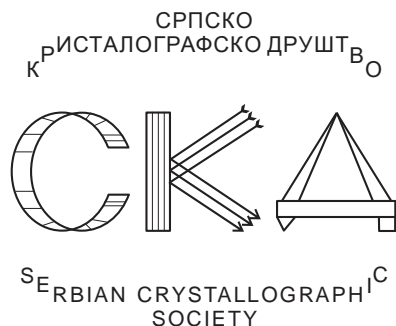
Изводи радова / XXIII конференција Српског кристалографског друштва, АндРЕВЉЕ, [9-11. 6.]  
2016. ; [уредник Оливера Клисурић] = Abstracts / 23rd Conference of the Serbian Crystallographic Soci-  
ety, Andrevlje, [9-11. 6.] 2016. ; [editor Olivera Klisurić]. - Београд : Српско кристалографско друштво,  
2016 (Петроварадин : Футура). - 106 стр. : илустр. ; 25 cm

Упоредо енгл. и срп. текст. - Тираж 100.

ISBN 978-86-912959-3-6

1. Ур. ств. насл.

а) Кристалографија - Апстракти б) Минералологија - Апстракти



**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ  
ДРУШТВА**

**23<sup>rd</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC  
SOCIETY**

**Научни одбор:**

Др Дејан Полети, ТМФ, Београд  
Др Јелена Роган, ТМФ, Београд  
Др Љиљана Карановић, РГФ, Београд  
Др Срећко Трифуновић, ПМФ, Крагујевац  
Др Александар Кременовић, РГФ, Београд  
Др Предраг Вулић, РГФ, Београд  
Др Агнеш Капор, ПМФ, Нови Сад  
Др Срђан Ракић, ПМФ, Нови Сад  
Др Olivera Klisuriћ, ПМФ, Нови Сад  
Др Snežana Zarić, ХФ, Београд  
Др Bratislav Antić, „ВИНЧА”, Београд  
Др Goran Bogdanović, „ВИНЧА”, Београд  
Др Slađana Novaković, „ВИНЧА”, Београд

**Scientific Committee:**

Dr. Dejan Poleti, TMF, Belgrade  
Dr. Jelena Rogan, TMF, Belgrade  
Dr. Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade  
Dr. Srećko Trifunović, PMF, Kragujevac  
Dr. Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade  
Dr. Predrag Vulić, RGF, Belgrade  
Dr. Agneš Kapor, PMF, Novi Sad  
Dr. Srđan Rakić, PMF, Novi Sad  
Dr. Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad  
Dr. Snežana Zarić, HF, Belgrade  
Dr. Bratislav Antić, “VINČA”, Belgrade  
Dr. Goran Bogdanović, “VINČA”, Belgrade  
Dr. Slađana Novaković, “VINČA”, Belgrade

**Организациони одбор:**

Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad  
Marko Rodić, PMF, Novi Sad  
Ljiljana Vojinović Ješić, PMF, Novi Sad  
Mirjana Radanović, PMF, Novi Sad

**Organizing Committee:**

Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad  
Marko Rodić, PMF, Novi Sad  
Ljiljana Vojinović Ješić, PMF, Novi Sad  
Mirjana Radanović, PMF, Novi Sad

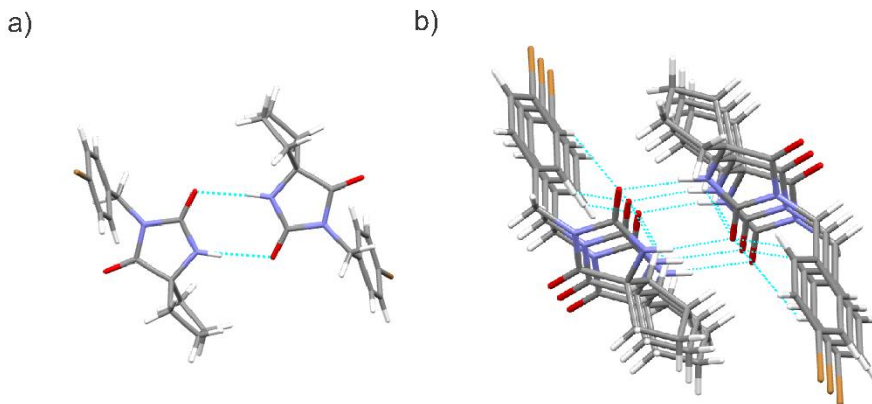
## СТРУКТУРНА И CLP АНАЛИЗА 3-[(4-БРОМОФЕНИЛ)МЕТИЛ]- -1,3-ДИАЗАСПИРО[4.4]НОНАН-2,4-ДИОНА

А. Лазих<sup>1</sup>, Н. Тришовић<sup>1</sup>, Ј. Радовановић<sup>1</sup>, Ж. Витник<sup>2</sup>, В. Витник<sup>2</sup>,  
Ј. Роган<sup>1</sup>, Д. Полети<sup>1</sup>, Г. Ушћумлић<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Технолошко-металурички факултет, Универзитет у Београду; <sup>2</sup>ИХТМ–Центар за хемију, Универзитет у Београду  
e-mail: ntrisovic@tmf.bg.ac.rs

Анализа структурних својстава нових једињења која садрже чврсто језгро и вишеструке донорске и акцепторске атоме може да допринесе бољем разумевању узајамног дејства нековалентних интеракција у изградњи могућих супрамолекулских архитектура. У том циљу синтетисана је серија нових деривата циклопентан-5-спирохидантоина и одређена је њихова кристална структура. У овом раду описана је и дискутована кристална структура (3-[(4-бромофенил)метил]-1,3-дiazаспиро[4.4]нонан-2,4-диона (слике 1 и 2). Једињење кристалише у центросиметричној, моноклиничној просторној групи  $P2_1/n$  са једним молекулом у асиметричној јединици. Детаљна анализа кристалног паковања указала је на постојање уобичајених  $N-H\cdots O$  водоничних веза, као и на појаву  $S-H\cdots O$ ,  $S-H\cdots \pi$  и  $S-H\cdots Br$  интеракција. Такође, нађени су и кратки контакти типа  $S-Br\cdots O=C$ . Доприноси ових интеракција у изградњи кристалног паковања квантификовани су на основу израчунавања методом Coulomb–London–Pauli (CLP) [1]. У спрези са прегледом кристалних структура деривата хидантоина у Кембричкој бази кристалних структура, разматрање енергије интеракција различитих парова молекула омогућиће утврђивање зависности између њихове молекулске и кристалне структуре.

[1] J. D. Dunitz, A. Gavezzotti, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **44** (2005) 1766–1787.



Слика 1. а)  $R_2^2(8)$  синтон; б) приказ димеризованих ланаца дуж  $b$ -осе.  
Fig. 1. а)  $R_2^2(8)$  synthon; б) dimmerized chains along  $b$ -axis.

## STRUCTURAL AND CLP ANALYSIS OF 3-[(4-BROMOPHENYL)METHYL]- 1,3-DIAZASPIRO[4.4]NONANE-2,4-DIONE

A. Lazić<sup>1</sup>, N. Trišović<sup>1</sup>, L. Radovanović<sup>1</sup>, Ž. Vitnik<sup>2</sup>, V. Vitnik<sup>2</sup>, J. Rogan<sup>1</sup>,  
D. Poletić<sup>1</sup>, G. Ušćumlić<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade; <sup>2</sup>ICTM – Department of  
Chemistry, University of Belgrade

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

The analysis of structural features of new compounds comprising a rigid core with multiple donor and acceptor atoms can enhance our understanding of the interplay between noncovalent interactions in building possible supramolecular assemblies. In this respect, a series of new cyclopentane-5-spirohydantoin derivatives has been synthesized and their crystal structures have been investigated (Figs. 1 and 2). Herein, the crystal structure of 3-[(4-bromophenyl)methyl]-1,3-diazaspiro[4.4]nonane-2,4-dione is described and discussed. The compound crystallizes in the monoclinic, centrosymmetric space group  $P2_1/n$  with one molecule in the asymmetric unit. A detailed analysis of the crystal packing revealed the presence of usual  $N-H\cdots O$  hydrogen bonds along with  $C-H\cdots O$ ,  $C-H\cdots\pi$  and  $C-H\cdots Br$  interactions. Furthermore, a short  $C-Br\cdots O=C$  contact also contributed to the crystal packing. The stabilizing–destabilizing role of these interactions in terms of favorable energetic was quantified using the Coulomb–London–Pauli (CLP) method [1]. Supported with a survey of crystal structures containing the hydantoin moiety in the Cambridge Structural Database, the decomposition of the interaction energies obtained for different molecular pairs will provide a base for the evaluation of the relationships between molecular and crystal structure of hydantoin derivatives.

[1] J. D. Dunitz, A. Gavezzotti, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **44** (2005) 1766–1787.

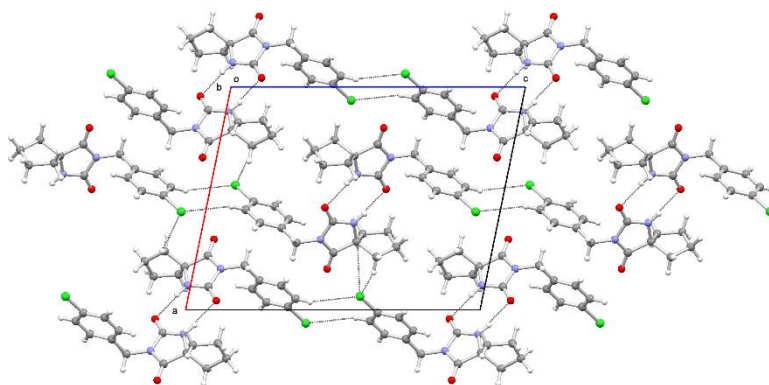


Fig. 2. Crystal packing of the investigated compound, projection onto the  $ac$ -plane.  
Слика 2. Кристално паковање проучаваних једињења, пројекција на  $ac$ -раван.