

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

27th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Abstracts

Крагујевац – Kragujevac
2021.

XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА
Изводи радова

27th 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**

**27th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:

др Љилјана 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 Glđović, 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 Kragujevac
др Данијела Стојковић, ИИТ Крагујевац / dr Danijela Stojković, ИТ Kragujevac
др Едина Авдовић, ИИТ Крагујевац / dr Edina Avdović, ИТ Kragujevac
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

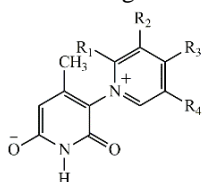
SAMOORGANIZACIJA PAKOVANJA DIPOL-JON PIRIDONA PREKO MOLEKULA VODE

A. Mašulović^a, J. Ladarević^b, L. Radovanović^a, K. Gak Simić^a, N. Trišović^b, J. Rogan^b, D. Mijin^b

^aInovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija ^bTehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija

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

Pažnja farmaceutske industrije u velikoj meri usmerena je na razumevanje sposobnosti molekula vode da se inkorporiraju u kristalno pakovanje organskih molekula uspostavljanjem različitih nekovalentnih intermolekulskih interakcija [1]. 2-Piridon je gradivna jedinica mnogih supstanci koje poseduju antibakterijsku, antifungalnu, antiinflamatornu, antiviralnu i antikancerogenu aktivnost [2]. U ovom radu, dva piridona, koja sadrže metil supstituisano piridinsko jezgro u položajima 2,4 (**2**) i 3,5 (**3**) i jedan piridon sa nesupstituisanim (**1**) piridinskim jezgrom (slika), sintetisani su Guarešić-Torpeovom reakcijom kondenzacije. Jedinjenja su okarakterisana rendgenskom strukturnom analizom kao i određivanjem tačke topljenja,



Compound	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄
1	-H	-H	-H	-H
2	-H	-CH ₃	-H	-CH ₃
3	-CH ₃	-H	-CH ₃	-H

Slika. Strukturna formula dipol-jona **1**, **2** i **3**.

UV-Vis, FT-IR, ¹H i ¹³C NMR spektroskopijom. Asimetrične jedinice jedinjenja **1**·**2H₂O** i **3**·**2H₂O** sastoje se od jednog molekula piridona i dva molekula vode, dok se u asimetričnoj jedinici jedinjenja **2**·**4H₂O** nalaze četiri molekula vode. Inverzno orijentisani molekuli uspostavljaju N–H···O vodonične veze i na taj način obrazuju R₂²(8) sintone. Tipovi vodenih kanala u supramolekulskoj arhitekturi zavise od prirode interakcija između dipol-jona. Dipol-dipol interakcije, jake i slabe vodonične veze, π···π i C–H···π interakcije, određuju pakovanje ovih molekula, pri čemu molekuli vode imaju značajnu ulogu.

Kristalografski podaci: **1**·**2H₂O**: C₁₁H₁₄N₂O₄, M_r = 238,24, trikliničan sistem, prostorna grupa P $\bar{1}$, a = 7,2258(14), b = 8,0470(16), c = 11,287(2) Å, α = 70,71(3), β = 74,88(3), γ = 79,85(3)°, V = 595,1(2) Å³, R₁ = 0,0492; **2**·**4H₂O**: C₁₃H₂₂N₂O₆, M_r = 302,32, trikliničan sistem, prostorna grupa P $\bar{1}$, a = 7,4411(15), b = 10,581(2), c = 11,235(2) Å, α = 108,96(3), β = 96,14(3), γ = 107,41(3)°, V = 777,6(3) Å³, R₁ = 0,0443; **3**·**2H₂O**: C₁₃H₁₈N₂O₄, M_r = 266,29, trikliničan sistem, prostorna grupa P $\bar{1}$, a = 7,5951(8), b = 9,0353(8), c = 11,5716(10) Å, α = 82,878(7), β = 72,010(8), γ = 71,919(9)°, V = 717,62(13) Å³, R₁ = 0,0522.

[1] J. van de Streek, J. Rantanen, A. D. Bond, *Acta Crystallographica*, **C69** (2013) 1229–1233.

[2] I. Khan, P. Panini, S. Ud-Din Khan, U. Ali Rana, H. Andleeb, D. Chopra, S. Hameed, J. Simpson, *Crystal Growth and Design*, **16** (2016) 1371–1386.

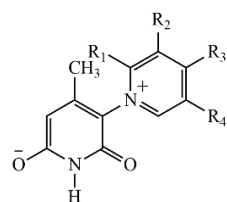
WATER ASSISTED ASSEMBLY OF PYRIDONE ZWITTERIONS

A. Mašulović^a, **J. Ladarević**^b, **L. Radovanović**^a, **K. Gak Simić**^a, **N. Trišović**^b, **J. Rogan**^b, **D. Mijin**^b

^aInnovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia; ^bFaculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

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

The attention of pharmaceutical industry is set on understanding the ability of water molecules to accompany organic crystals through interplay of various non-covalent intermolecular interactions [1]. 2-Pyridone is found as a structural



Compound	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄
1	-H	-H	-H	-H
2	-H	-CH ₃	-H	-CH ₃
3	-CH ₃	-H	-CH ₃	-H

unit in many compounds with antibacterial, antifungal, anti-inflammatory, antiviral or anticancer activity [2]. In this paper, two pyridone derivatives bearing methyl substituents in the pyridine unit in positions 2,4 (2) and 3,5 (3) were synthesized *via* the Guareschi-Thorpe condensation as well as one pyridone without substituents (1) in the

Figure. Structural formula of zwitterions 1, 2 and 3.

pyridine scaffold (Figure). These compounds were characterized by single-crystal X-ray analysis as well as determination of the melting points, UV-Vis, FTIR, ¹H and ¹³C NMR spectroscopy. The asymmetric units of compounds **1**·2H₂O and **3**·2H₂O are comprised of one pyridone molecule and two water molecules, whereas the asymmetric unit of compound **2**·4H₂O incorporates four water molecules. Pairs of N–H···O hydrogen bonds connect inversion related molecules into the $R_2^2(8)$ synthons in the supramolecular architectures. The type of water channel depends on the nature of interactions established between zwitterions. Molecular packing is governed by dipole-dipole interactions, strong and weak hydrogen bonds, π - π and C–H··· π interactions, wherein water molecules play a significant role.

Crystal data: **1**·2H₂O: C₁₁H₁₄N₂O₄, *M_r* = 238.24, triclinic, space group $P\bar{1}$, *a* = 7.2258(14), *b* = 8.0470(16), *c* = 11.287(2) Å, α = 70.71(3), β = 74.88(3), γ = 79.85(3)°, *V* = 595.1(2) Å³, *R*₁ = 0.0492; **2**·4H₂O: C₁₃H₂₂N₂O₆, *M_r* = 302.32, triclinic, space group $P\bar{1}$, *a* = 7.4411(15), *b* = 10.581(2), *c* = 11.235(2) Å, α = 108.96(3), β = 96.14(3), γ = 107.41(3)°, *V* = 777.6(3) Å³, *R*₁ = 0.0443; **3**·2H₂O: C₁₃H₁₈N₂O₄, *M_r* = 266.29, triclinic, space group $P\bar{1}$, *a* = 7.5951(8), *b* = 9.0353(8), *c* = 11.5716(10) Å, α = 82.878(7), β = 72.010(8), γ = 71.919(9)°, *V* = 717.62(13) Å³, *R*₁ = 0.0522.

[1] J. van de Streek, J. Rantanen, A. D. Bond, *Acta Crystallographica*, **C69** (2013) 1229–1233.

[2] I. Khan, P. Panini, S. Ud-Din Khan, U. Ali Rana, H. Andleeb, D. Chopra, S. Hameed, J. Simpson, *Crystal Growth and Design*, **16** (2016) 1371–1386.