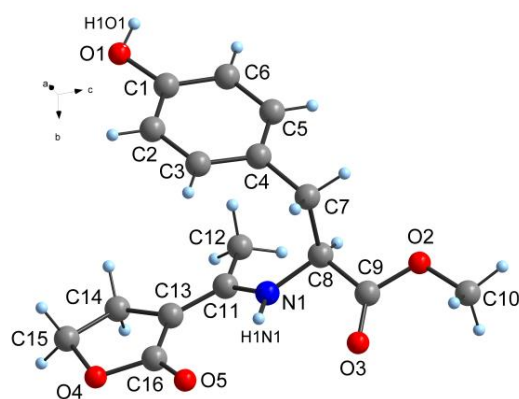


СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

XXII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА  
Изводи радова

22<sup>nd</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY  
Abstracts



Смедерево-Smederevo  
2015

XXII КОНФЕРЕНЦИЈАСРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА  
Изводи радова

22<sup>nd</sup> 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**

**22<sup>nd</sup> 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 Клисурић, 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

<b>Б. Радиша, Б. Мисаиловић, А. Жекић, М. Митровић</b> <i>ЗАВИСНОСТ БРЗИНА РАСТА МАЛИХ КРИСТАЛА НАТРИЈУМ-ХЛОРАТА</i> <i>ОД РЕЛАТИВНОГ ПРЕСИЂЕЊА РАСТВОРА.....</i>	38
<b>B. Radiša, B. Misailović, A. Žekić, M. Mitrović</b> <i>DEPENDENCE OF SMALL SODIUM CHLORATE CRYSTALS GROWTH</i> <i>RATES ON RELATIVE SUPERSATURATION OF THE SOLUTION.....</i>	39
<b><u>Danijela Lj. Stojković, Verica V. Jevtić, Nenad Vuković, Milena Vukić,</u></b> <b><u>Gordana P. Radić, Ivan Potočnjak, Srećko R. Trifunović</u></b> <i>SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA 2-ACETILBUTIROLAKTONA SA METIL</i> <i>ESTROM L-TIROZINA.....</i>	40
<b><u>Danijela Lj. Stojković, Verica V. Jevtić, Nenad Vuković, Milena Vukić,</u></b> <b><u>Gordana P. Radić, Ivan Potočnjak, Srećko R. Trifunović</u></b> <i>SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF 2-ACETYLBUTYROLACTONE</i> <i>WITH METHYL ESTER OF L-TYROSINE.....</i>	41
<b><u>Gordana P. Radić, David. Capucci, Alessia Bacchi, Danijela Lj. Stojković,</u></b> <b><u>Verica V. Jevtić, Nenad Vuković, Milena Vukić, Katarina Anđelković,</u></b> <b><u>Srećko R. Trifunović</u></b> <i>SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA PALADIJUM(II) KOMPLEKSA SA</i> <i>METIL 2-(1-(2,4-DIOKSOHROMAN-3-ILIDEN)ETILAMINO)ACETATOM.....</i>	42
<b><u>Gordana P. Radić, Davide Capucci, Alessia Bacchi, Danijela Lj. Stojković,</u></b> <b><u>Verica V. Jevtić, Nenad Vuković, Milena Vukić, Katarina Anđelković,</u></b> <b><u>Srećko R. Trifunović</u></b> <i>SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF PALLADIUM(II) COMPLEX</i> <i>WITH METHYL 2-(1-(2,4-DIOXOCHROMAN-3-</i> <i>-YLIDENE)ETHYLAMINO)ACETATE.....</i>	43
<b><u>G. Janjić, S. Jelić, M. Radibratović, M. Milčić</u></b> <i>PRIMENA KRISTALOGRAFSKIH PODATAKA U ISPITIVANJU INTERAKCIJA</i> <i>FLUORA U KRISTALNIM STRUKTURAMA MALIH MOLEKULA.....</i>	44
<b><u>G. Janjić, S. Jelić, M. Radibratović, M. Milčić</u></b> <i>THE APPLICATION OF CRYSTALLOGRAPHIC DATA FOR STUDY OF</i> <i>INTERACTIONS OF FLUORINE ATOM IN THE CRYSTAL STRUCTURE OF</i> <i>SMALL MOLECULES.....</i>	45
<b><u>J. Anđrić, G. Janjić, M. Milovanović, S. D. Zarić</u></b> <i>ПРИВЛАЧНЕ ИНТЕРАКЦИЈЕ НЕВОДОНИЧНО БЕЗАНИХ МОЛЕКУЛА</i> <i>ВОДЕ.....</i>	46
<b><u>J. Anđrić, G. Janjić, M. Milovanović, S. D. Zarić</u></b> <i>ATTRACTIVE INTERACTIONS BETWEEN NON-HYDROGEN-BONDED</i> <i>WATER MOLECULES.....</i>	47

# PRIMENA KRISTALOGRAFSKIH PODATAKA U ISPITIVANJU INTERAKCIJA FLUORA U KRISTALNIM STRUKTURAMA MALIH MOLEKULA

G. Janjić<sup>a</sup>, S. Jelić<sup>b</sup>, M. Radibratović<sup>a</sup>, M. Milčić<sup>b</sup>

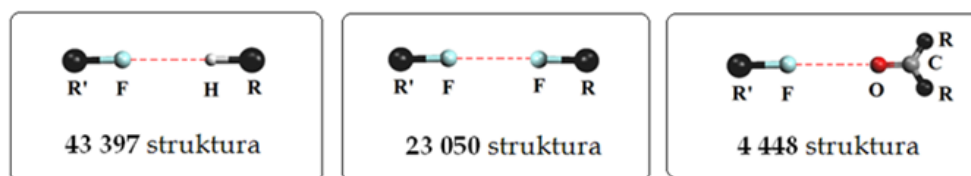
<sup>a</sup>Institut za Hemiju, Tehnologiju i Metalurgiju, Univerzitet u Beogradu, Njegoševa 12, 11000 Beograd, Srbija; <sup>b</sup>Hemijski fakultet, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 12-16, 11000 Beograd, Srbija;

e-mail: janjic\_goran@vhem.bg.ac.rs

Veliki broj jedinjenja sadže atome halogena kao konstituent. Halogeni elementi poseduju anizotropnu raspodelu naelektrisanja sa negativno naelektrisanim regionom, ali i regionom sa pozitivnim naelektrisanjem koji se pruža duž C-X veze ( $\sigma$ -hol) [1]. Pokazano je da se sa povećanjem poluprečnik halogena povećava i pozitivno naelektrisanje  $\sigma$ -hola, a da veličina ovog hola zavisi od elektronegativnosti atoma vezanog za halogen. Atomi fluora se ponašaju drugačije od ostalih halogena jer karakter C-F veze zavisi od lokalnog okruženja atoma fluora [2], koje može biti odgovorno za tip i prirodu interakcija atoma fluora. U Proteinskoj banci podataka, fluorovi atomi pokazali su tendenciju da se nađu u blizini hidrofobnih bočnih aminokiselinskih ostataka ili u blizini karbonilne grupe [3].

Interakcije atoma fluora su ispitane analizom podataka dobijenih iz kristalnih struktura, arhiviranih u Kembričkoj bazi strukturnih podataka. Statistička analiza ovih podataka pokazala je da su najzastupljenije strukture u kojima fluorovi atomi grade vodonične veze. Među njima, CH/F interakcije su brojnije (68707 interakcija) od klasičnih vodoničnih veza (4703 NH/F i 2882 OH/F interakcija). Iznenadjući je podatak da su XF/F i XF/O interakcije takođe jako zastupljene u kristalnim strukturama (*Slika*). Međutim, najzastupljeniji tip interakcija atoma fluora u Kembričkoj bazi strukturnih podataka su interakcije između dva atoma fluora (150993 XF/F interakcija)

Rezultati kvantno-hemijskih proračuna pokazali su da se najstabilnija XF/F interakcija javlja između dva CH<sub>3</sub>F molekula, sa energijom veze od -1,45 kcal/mol. Ove interakcije su značajno slabije od klasičnih vodoničnih veza. Velika zastupljenost XF/F interakcija u kristalnim strukturama može se objasniti težnjom fluorovog atoma da formira tri ili više simultane interakcije sa vrstama iz okruženja.



[1] P. Politzer, J. Murray, T. Clark, Phys. Chem. Chem. Phys. 15 (2013) 11178-11189.

[2] A. Vulpetti, U. Hommel, G. Landrum, R. Lewis, C. Dalvit, J. Am. Chem. Soc. 131 (2009) 12949-12959.

[3] M. Zurcher, F. Diederich, J. Org. Chem. 73 (2008) 4345-4361.

# THE APPLICATION OF CRYSTALLOGRAPHIC DATA FOR STUDY OF INTERACTIONS OF FLUORINE ATOM IN THE CRYSTAL STRUCTURE OF SMALL MOLECULES

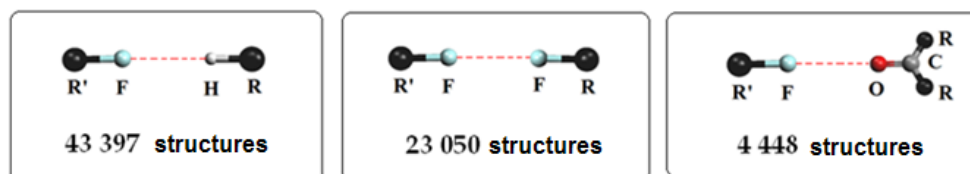
G. Janjić<sup>a</sup>, S. Jelić<sup>b</sup>, M. Radibratović<sup>a</sup>, M. Milčić<sup>b</sup>

<sup>a</sup>ICTM, University of Belgrade, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; <sup>b</sup>Department of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia;  
e-mail: janjic\_goran@vhem.bg.ac.rs

Large number of compounds has halogens incorporated in their structure. Halogens have an anisotropic charge distribution with a region of negative charge and a region of positive charge along the C-X bond ( $\sigma$ -hole) [1]. Larger halogens form more positive  $\sigma$ -hole, while the size of the  $\sigma$ -hole is affected by the electronegativity of the atoms bonded to halogen atom. Fluorine behaves different from other halogens, because the character to the C-F bond depends on the local environment of the fluorine [2], which might be relevant for the type and nature of molecular interactions of fluorine atoms. In Protein Data Bank, the fluorine atoms are found preferentially in close contact with hydrophobic side-chains and in close to carbonyl group [3].

The interactions of fluorine atoms were studied by analyzing data from the crystal structures of small molecules, archived in the Cambridge Structural Database (CSD). Statistical analysis showed that the most abundant are structures in which F atoms build hydrogen bonds. Among them the CH/F interactions are more frequent (68707 interactions) than classical hydrogen bonds (4703 NH/F and 2882 OH/F interactions). Surprisingly, the XF/F and XF/O interactions were shown to be abundant in the crystal structures (*Figure*). However, the most common interactions of fluorine atom in the CSD are interactions between two fluorine atoms (150993 XF/F interactions).

The results of quantum-chemical calculations showed that the most stable XF/F interaction occurs between two CH<sub>3</sub>F molecules with energy of -1.45 kcal/mol. These interactions are significantly weaker than classical hydrogen bonds. The large abundance of XF/F interactions in crystal structures can be explained by tendency of fluorine atoms to form three or more simultaneous interactions with species from the environment.



[1] P. Politzer, J. Murray, T. Clark, Phys. Chem. Chem. Phys. 15 (2013) 11178-11189.

[2] A. Vulpetti, U. Hommel, G. Landrum, R. Lewis, C. Dalvit, J. Am. Chem. Soc. 131 (2009) 12949-12959.

[3] M. Zurcher, F. Diederich, J. Org. Chem. 73 (2008) 4345-4361.