

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

ОРГАНИЗАТОРИ / ORGANIZERS



СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY



УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ – ХЕМИЈСКИ
ФАКУЛТЕТ
UNIVERSITY OF BELGRADE – FACULTY OF
CHEMISTRY

СПОНЗОР / SPONSOR



МИНИСТАРСТВО НАУКЕ, ТЕХНОЛОШКОГ РАЗВОЈА
И ИНОВАЦИЈА РЕПУБЛИКЕ СРБИЈЕ
MINISTRY OF SCIENCE, TECHNOLOGICAL
DEVELOPMENT AND INNOVATION OF THE REPUBLIC
OF SERBIA

ЈАКЕ ВОДОНИЧНЕ ВЕЗЕ СА УГЉЕНИКОМ КАО АКЦЕПТОРОМ АТОМА ВОДОНИКА

Д. Ж. Вељковић^а, М. Малинић^а, И. С. Вељковић^б, В. Медаковић^а

^а Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12–16, Београд, Србија; ^б Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију, институт од националног значаја, Његошева 12, Београд, Србија
e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

Пирамидан (тетрацикло[2.1.0.0^{1,3}.0^{2,5}]пентан, C₅H₄) и његови деривати припадају групи високоенергетских молекула са некласичним геометријама у виду кавеза [1]. Иако сам пирамидан још увек није синтетисан, молекули који се састоје из трочланих прстенова под напоном са атомом угљеника на врху су синтетисани и њихове структуре су одређене. Ово пружа прилику за проучавање нековалентног везивања наведеног атома угљеника у ангуларно напрегнутим системима. У овом раду смо анализирали кристалне структуре и урадили прорачуне енергија интеракције да бисмо проценили могућност атома угљеника из пирамидана и аналогних молекула да учествују у водоничном везивању као акцептори водоника.

Анализа структура из Кембричке базе структурних података (CSD) је показала да постоје кратки контакти између наведених атома угљеника и водоника из X-H фрагмената. Резултати квантохемијских прорачуна рађених на MP2/DEF2-TZVP нивоу су показали да пирамидан и његови деривати могу да учествују у јаким водоничним везама посредством атома угљеника као акцептора водоника. Прорачуни су показали да енергија O-H...C водоничне везе између тетраметил-деривата пирамидана и воде износи $\Delta E = -6,86$ kcal/mol. Ово је знато јача водонична веза од оне која постоји између два молекула воде ($\Delta E = -5,02$ kcal/mol). Резултати овог истраживања могу бити од великог значаја за препознавање некласичних водоничних веза у којима учествују ангуларно напрегнуте системи, као и у процени њихових високоенергетских карактеристика.

Истраживање спроведено уз подршку Фонда за науку Републике Србије, ПРОМИС, #6066886, CD-HEM. Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије, Евиденциони број: 451-03-47/2023-01/200168 и 451-03-47/2023-01/200026.

[1] J. P. Kenny, K. M. Krueger, J. C. Rienstra-Kiracofe, H. F. Schaefer, *J. Phys. Chem. A*, **105** (2001) 7745–7750.

STRONG HYDROGEN BONDS INVOLVING CARBON ATOM AS HYDROGEN ATOM ACCEPTOR

D. Ž. Veljković^a, M. Malinić^a, I. S. Veljković^b, V. Medaković^a

^a University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg, 12–16, Belgrade, Serbia;

^b University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Re-public of Serbia, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia

e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

Pyramidane (tetracyclo[2.1.0.0^{1,3}.0^{2,5}]pentane, C₅H₄) and its derivatives fall into the class of high-energy molecules with nonclassical cage geometries [1]. Although pyramidane itself has not been synthesized yet, cage molecules with strained triangular rings and an apex carbon atom were synthesized and their structures were determined. This provides an opportunity for the assessment of noncovalent bonding of the apex carbon atom in highly strained systems. Here, we analysed crystal structures and performed interaction energies calculations to evaluate possibility of the apex carbon atom from pyramidane and pyramidane-like molecules to act as hydrogen atom acceptors in hydrogen bonds.

Analysis of crystal structures from Cambridge Structural Database (CSD) showed that there are short hydrogen-carbon contacts between apex carbon atom from pyramidane-like structures and hydrogen atoms from X-H fragments. Results of quantum chemical calculations performed on MP2/DEF2-TZVP level showed that pyramidane molecules and its derivatives can form strong hydrogen bonds involving apex carbon atom as hydrogen atom acceptor. Calculated energy of O-H...C hydrogen bond between apex carbon atom of tetramethyl derivative of pyrimidine and water was $\Delta E = -6.86$ kcal/mol. This is significantly stronger than hydrogen bond between two water molecules ($\Delta E = -5.02$ kcal/mol). Results of this study can be of great importance for the recognition of nonclassical hydrogen bonds involving highly strained molecules. In addition, results presented here may help in the assessment of high-energy properties of strained cage molecules.

This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, #6066886, CD-HEM. This work was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia (Contract numbers: 451-03-47/2023-01/200168 and 451-03-47/2023-01/200026).

[1] J. P. Kenny, K. M. Krueger, J. C. Rienstra-Kiracofe, H. F. Schaefer, *J. Phys. Chem. A*, **105** (2001) 7745–7750.