

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

XXVI КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

26th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Abstracts

Сребрно језеро – Silver Lake
2019.

XXVI KONFERENCIJA SRPSKOG KRISTALOGRAFSKOG DRUŠTVA

Изводи радова

26th 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:

Јелена Роган – Jelena Rogan

Уредник – Editor:

Александра Дапчевић – Aleksandra Dapčević

Технички уредник – Technical editor:

Лидија Радовановић – Lidija Radovanović

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 978-86-912959-5-0

ISSN 0354-5741

Штампа – Printing:

Технолошко-металушки факултет, Развојно-истраживачки центар Графичког инжењерства, Карнегијева 4, Београд, Србија

Faculty of Technology and Metallurgy, Research and Development Centre of Printing Technology, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

Тираж – Copies: 100

Београд – Belgrade

2019.

ДА ЛИ СУ УГЛОВИ МОЛЕКУЛА ВОДЕ У КРИСТАЛНИМ
СТРУКТУРАМА ПОУЗДАНИ?
УДРУЖЕНА АНАЛИЗА КЕМБРИЧКЕ КРИСТАЛОГРАФСKE
БАЗЕ ПОДАТАКА И *AB-INITIO* ПРОРАЧУНА.

**М. Р. Миловановић^а, Ј. М. Живковић^а, Д. Б. Нинковић^а, И. М. Станковић^б,
С. Д. Зарић^{в,г}**

^а Иновациони центар Хемијског факултета, Студентски трг, 12-16, 11000 Београд, Србија; ^б Институт за Хемију, Технологију и Металургију, Универзитет у Београду, Његошева 12, 11000 Београд, Србија; ^в Хемијски факултет, Универзитет у Београду, Студентски трг, 12-16, 11000 Београд, Србија; ^г Департман за хемију, Тексас A&M Универзитет у Катару, Поштански фах 23874, Доха, Катар
e-mail: milovanovicmilan11@gmail.com

Молекул воде је свеprisутан у природи. Због поларне структуре и способности водоничног везивања, молекули воде играју важну улогу у многим животним процесима, као и у паковању кристалних структура малих молекула. Током протеклих деценија, структура молекула воде интензивно је проучавана [1,2]. Утврђено је да слободни молекул воде у гасној фази има угао везе (H–O–H) од $104,52 \pm 0,05^\circ$ [3], док је угао везе код кристалних хидрата из више од 40 структура решених неутронском дифракционом анализом у распону од $102,50^\circ$ до $115,25^\circ$ [4]. Прорачуни потенцијалних површина спектроскопских енергија показали су да равнотежна структура молекула воде има угао везе од $104,501 \pm 0,005$ [5].

У овом истраживању, анализирали смо структуре, архивирани у Кембричкој кристалографској бази података, које садрже воду и извршили *ab-initio* прорачуне за различите углове везе у молекулу воде.

Резултати анализе структура које су решене неутронском и рендгенском дифракционом анализом са R фактором $\leq 0,1$ показали су да постоји велика несагласност вредности углова везе од идеалне/их. Наиме, опсег угла везе у неутронски решеним структурама је $79,76$ – $141,64^\circ$, док је у рендгенски решеним структурама $17,03$ – $180,00^\circ$. Израчунавањем криве потенцијалне енергије са променом угла везе показано је да су углови везе изван опсега од око $93,0$ – $116,0^\circ$ прилично сумњиви. Сходно томе, то би довело у питање најмање 15% рендгенски решених структура које садрже упитне геометрије молекула воде.

[1] F. Martin, H. Zipse, *J. Comput. Chem.*, **26** (2005) 97–105.

[2] K. Ichikawa, Y. Kameda, T. Yamaguchi, H. Wakita, M. Misawa, *Mol. Phys.*, **73** (1991) 79–86.

[3] W. S. Benedict, N. Gailar, E.K. Plyler, *J. Chem. Phys.*, **24** (1956) 1139–1165.

[4] G. Ferraris, M. Franchini- Angela, *Acta Crystallogr.*, **B28** (1972) 3572–3583.

[5] O.L. Polyansky, A.G. Császár, S.V. Shirin, N.F. Zobov, P. Barletta, J. Tennyson, D.W. Schwenke, P.J. Knowles, *Science*, **299** (2003) 239–242.

**ARE THE BOND ANGLES OF WATER MOLECULES IN
CRYSTAL STRUCTURES RELIABLE?
JOINT CAMBRIDGE STRUCTURAL DATABASE AND
AB-INITIO CALCULATION ANALYSIS.**

M. R. Milovanović^a, **J. M. Živković**^a, **D. B. Ninković**^a, **I. M. Stanković**^b,
S. D. Zarić^{c,d}

^a Innovation center of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, 11000, Serbia; ^b Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; ^c Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, Belgrade, 11000, Serbia; ^d Texas A&M University at Qatar, Education City, PO Box 23874, Doha, Qatar
e-mail: milovanovicmilan11@gmail.com

Water molecule is omnipresent in nature. Due to polar structure and ability for hydrogen bonding water molecule plays important role in many life processes as well as in packing of small molecules crystal structures. Over the past decades, the structure of water molecule has been intensively studied [1,2]. It has been found that a free water molecule in gas phase has the bond angle (H–O–H) of $104.52 \pm 0.05^\circ$ [3], while the bond angle of crystalline hydrates from over 40 structures solved by neutron diffraction analysis is in range from 102.50° to 115.25° [4]. Spectroscopic potential energy surface based calculations showed that equilibrium structure of water molecule has the bond angle of $104.501^\circ \pm 0.005$ [5].

In this study, we performed an analysis of water containing structures archived in Cambridge Structural Database (CSD) as well as *ab-initio* calculations on a range of bond angles of water molecule.

Results of analysis of structures solved by neutron as well as by X-ray diffraction analysis with *R* factor ≤ 0.1 showed that there is a large discrepancy of the bond angle values from the ideal one(s). Namely, the range of the bond angle in neutron solved structures is 79.76 – 141.64° while in X-ray solved structures is 17.03 – 180.00° . By calculating the energy protentional curve of the bond angle change it is shown the bond angles beyond the range of ca. 93.0 – 116.0° are rather doubtful. Accordingly, it would lead to at least 15% of X-ray solved structures that contain questionable water molecule geometries.

[1] F. Martin, H. Zipse, *J. Comput. Chem.*, **26** (2005) 97–105.

[2] K. Ichikawa, Y. Kameda, T. Yamaguchi, H. Wakita, M. Misawa, *Mol. Phys.*, **73** (1991) 79–86.

[3] W. S. Benedict, N. Gailar, E.K. Plyler, *J. Chem. Phys.*, **24** (1956) 1139–1165.

[4] G. Ferraris, M. Franchini- Angela, *Acta Crystallogr.*, **B28** (1972) 3572–3583.

[5] O.L. Polyansky, A.G. Császár, S.V. Shirin, N.F. Zobov, P. Barletta, J. Tennyson, D.W. Schwenke, P.J. Knowles, *Science*, **299** (2003) 239–242.