

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXV КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**25th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Бајина Башта – Вајина Вашта
2018.

КРИСТАЛОГРАФСКО И КВАНТНОХЕМИЈСКО ПРОУЧАВАЊЕ ИНТЕРАКЦИЈА СУМПОРА И ДИСУЛФИДНЕ ВЕЗЕ

И. Антонијевић^a, Д. Ж. Вељковић^b, Г. Сарих^b, К. Катанчевић^b, С. Д. Зарић^b

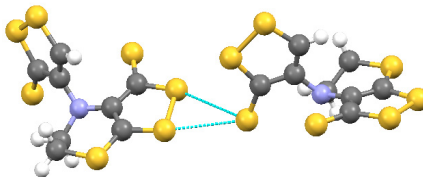
^aИнститут за хемију, технологију и металургију, Његошева 12, Београд, Србија;

^bУниверзитет у Београду - Хемијски факултет, Студентски трг 12 -16, Београд, Србија;

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

Показано је да сумпор-сумпор интеракције постоје у различитим молекулским системима. Геометрије и енергије сумпор-сумпор интеракција су испитиване у великој мери применом квантохемијских прорачуна и статистичке анализе геометријских параметара добијених из кристалних структура. Недавно је показано да сумпор-сумпор интеракције у кристалним структурама малих молекула преферирају паралелну оријентацију [1].

У овом раду испитиване су геометрије и енергије интеракција између сумпора и дисулфидне везе применом статистичке анализе података добијених претраживањем Кембричке базе структурних података и квантохемијских прорачуна. Резултати анализе контаката у кристалним структурама показују да сумпорима тежњу ка грађењу бифуркованих интеракција са дисулфидном везом док је тежња ка грађењу линеарних интеракција мања.



Кристална структура PUJRIV у којој постоји бифуркована S-S...S интеракција.

Квантохемијски прорачуни су урађени на различитим модел системима. Енергије интеракција као и геометрије су у складу са резултатима статистичке анализе кристалографских података. Енергија бифурковане интеракције износи -1,54 kcal/mol, док је линеарна интеракција слабија, -1,20 kcal/mol израчунато на врло прецизном CCSD(T)/CBS нивоу.

Израчунати електростатички потенцијали за интерагујуће молекуле су у сагласности са кристалографским и квантохемијским подацима.

Захвалница:

Овај рад је подржан од стране Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије [пројекат бр.72065]. И. С. Антонијевић се захваљује ИУСг за финансијску подршку.

[1] I. S. Antonijević, G. V. Janjić, M. K. Milčić, S. D. Zarić, *Cryst. Growth Des.*, **16** (2016) 632–639.

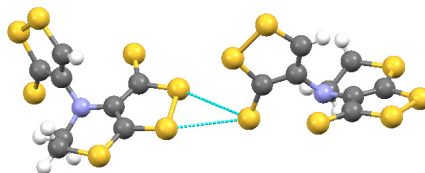
CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF INTERACTIONS BETWEEN SULFUR AND DISULFIDE BOND

I. S. Antonijević^a, D. Ž. Veljković^b, G. Sarić^b, K. Katančević^b, S. D. Zarić^b

^a *Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia;*
^b *University of Belgrade- Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;*
e-mail: ivana@chem.bg.ac.rs

It has been demonstrated that sulfur–sulfur interactions exist in various molecular systems. Geometries and energies of sulfur-sulfur interactions have been extensively studied by quantum chemical calculations and by statistical analysis of geometrical parameters obtained from crystal structures. Recently, it was shown that sulfur-sulfur interactions in crystal structures of small molecules prefer parallel orientations [1].

In this work geometries and energies of interactions between sulfur and disulfide bond were investigated using statistical analysis of data obtained by searching the Cambridge Structural Database (CSD) and quantum chemical calculations. Results of analysis of contacts found in the CSD show that sulfur atom in crystal structures have tendency towards the formation of bifurcated interaction with disulfide bond rather than linear interaction.



Crystal structure PUJRIV containing bifurcated S-S \cdots S interaction.

Quantum chemical calculations are performed on different model systems. Calculated interaction energies and geometries are in accordance with the results of statistical analysis of crystallographic data. The estimated energy for bifurcated interaction is -1.54 kcal/mol while linear interaction is weaker, -1.20 kcal/mol calculated on very accurate CCSD(T)/CBS level.

The calculated electrostatic potentials for interacting molecules are in agreement with both crystallographic and quantum chemical data.

Acknowledgements:

This work was supported by the Serbian Ministry of Education, Science and Technological Development [grant number 172065]. I. S. Antonijević would like to thank IUCr for financial support.

[1] I. S. Antonijević, G. V. Janjić, M. K. Milčić, S. D. Zarić, *Cryst. Growth Des.*, **16**(2016) 632–639.