

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

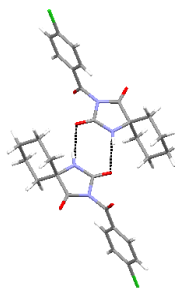
Крагујевац – Kragujevac
2021.

СУПРАМОЛЕКУЛСКА ОРГАНИЗАЦИЈА 3-(4-ХЛОРБЕНЗОИЛ)-1,3- ДИАЗАСПИРО[4.5]ДЕКАН-2,4-ДИОНА

К. Гак Симић^a, **А. Лазић^a**, **Л. Радовановић^a**, **Ј. Роган^b**, **Г. Јањић^c**, **И. Ђорђевић^c**,
Н. Тришовић^b

^a Иновациони центар Технолошко-металуришког факултета, Београд, Србија; ^b Технолошко-металуришки факултет, Универзитет у Београду, Београд, Србија; ^c Универзитет у Београду-Институт за хемију, технологију и металургију, Центар за хемију, Београд, Србија
e-mail: kgak@tmf.bg.ac.rs

Синтетисан је дериват циклохексан-5-спирохидантоина и одређена је његова кристална структура. Хијерархијски развој кристалног паковања дискутован је са аспекта кооперативности димерних мотива који настају преко различитих интермолекулских интеракција, и то: јаких N–H···O водоничних веза и слабих C–H···O, C–H···Cl и C–H···π интеракција. Кристално паковање задржава мотив, који се обично среће код деривата хидантоина, у коме су два инверзано оријентисана молекула повезана паром N–H···O водоничних веза (слика 1). Специфична структурна карактеристика јесу паралелни слојеви дуж ас-равни (слика 2). Пошто овај мотив повезује сваки други слој, растојање између слојева се наизменично мења. Накнадна анализа Хиршфелдове површине омогућила је разраду квалитативних и квантитативних доприноса интермолекулских интеракција проучаваном кристалном паковању.



Слика 1. Карактеристичан $R_2^2(8)$ прстен 3-(4-хлорбензоил)-1,3-
-дiazаспиро[4.5]декан-2,4-диона

Кристалографски подаци 3-(4-хлорбензоил)-1,3-дiazаспиро[4.5]декан-2,4-диона: $C_{15}H_{15}ClN_2O_3$, $M_r = 306.7$, триклинчан систем, просторна група $P-1$, $a = 6,2836(13)$, $b = 10,928(2)$, $c = 12,159(2)$ Å, $\alpha = 108,19(3)$, $\beta = 99,76(3)$, $\gamma = 104,73(3)$ °, $V = 738,4(3)$ Å³, $Z = 2$, $F(000) = 320$, $\rho_x = 1,380$ g cm⁻³, $\mu(Mo K\alpha) = 0,270$ mm⁻¹. Утачњавање са F^2 (190 параметара) дало је $R_1 = 0,0821$, $wR_2 = 0,1157$, $S = 1,031$ за све податке и $R_1 = 0,0548$ за 2707 уочених рефлексија са $I \geq 2\sigma(I)$.

SUPRAMOLECULAR ASSOCIATION IN 3-(4-CHLOROBENZOYL)-1,3-DIAZASPIRO[4.5]DECANE-2,4-DIONE

K. Gak Simić^a, **A. Lazić**^a, **L. Radovanović**^a, **J. Rogan**^b, **G. Janjić**^c, **I. Đorđević**^c, **N. Trišović**^b

^a Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia; ^b Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; ^c University of Belgrade - Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, Belgrade, Serbia

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

A derivative of cyclohexane-5-spirohydantoin was synthesized and its crystal structure was determined. The hierarchical development of the crystal packing was discussed through cooperativity of various dimeric motifs associated with the presence of different intermolecular interactions, namely strong N–H···O, and weaker C–H···O, C–H···Cl and C–H··· π interactions. The crystal packing retained the motif commonly found in hydantoin derivatives where two molecules related by inversion are linked by a pair of N–H···O hydrogen bonds (Figure 1). A hallmark structural feature was a parallel layer arrangement to the *ac*-plane (Figure 2) with alternating perpendicular separation, whereby this motif connect every second layer. An analysis of the Hirshfeld surface further elaborated the qualitative and quantitative contributions of intermolecular interactions to the crystal packing.

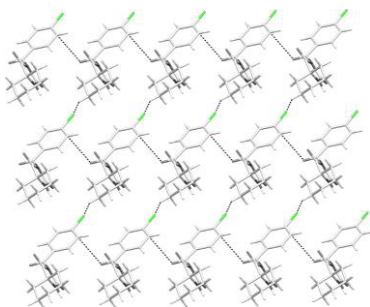


Figure 2. Part of the crystal packing of the investigated derivative of cyclohexane-5-spirohydantoin showing formation of a layer parallel to the *ac*-plane.

Crystal data for 3-(4-chlorobenzoyl)-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione: C₁₅H₁₅ClN₂O₃, M_r = 306.7, triclinic system, space group *P*-1, a = 6.2836(13), b = 10.928(2), c = 12.159(2) Å, α = 108.19(3), β = 99.76(3), γ = 104.73(3) °, V = 738.4(3) Å³, Z = 2, $F(000)$ = 320, ρ_x = 1.380 g cm⁻³, $\mu(\text{Mo } K\alpha)$ = 0.270 mm⁻¹. The refinement on F^2 (190 parameters) yielded R_1 = 0.0821, wR_2 = 0.1157, S = 1.031 for all data, and R_1 = 0.0548 for 2707 observed reflections with $I \geq 2\sigma(I)$.