

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО**

**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**28<sup>th</sup> 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

**28<sup>th</sup> 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

## 28<sup>th</sup> 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

## ТЕОРИЈСКО ПРОУЧАВАЊЕ $\text{Se}\cdots\text{Se}$ ИНТЕРАКЦИЈА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА

И. С. Вељковић <sup>a</sup>, Д. С. Кретић <sup>b</sup>, Д. Ж. Вељковић <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду - Институт за хемију, технологију и металургију, Његошева 12, Београд, Србија; <sup>b</sup> Универзитет у Београду - Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија  
e-mail: danijela@chem.bg.ac.rs

Халкогена веза је посебна врста нековалентних интеракција између позитивно наелектрисаних региона халкогених атома који се зову  $\sigma$ -шупљине и негативно наелектрисаних региона другог атома [1]. Халкогене везе у органоселенијумским једињењима имају значајну улогу у хемији, биохемији и кристалном инжењерству. Иако су умерено јаке, ове интеракције имају кључну улогу у одржавању својстава наноматеријала на бази селена [2]. Поред тога, недавне студије су показале да ове интеракције могу бити од суштинског значаја за биолошку активност многих лекова који садрже селен [2]. Овде је представљена детаљна анализа кристалографских података у комбинацији са квантохемијским прорачунима за  $\text{Se}\cdots\text{Se}$  интеракција у кристалним структурама органоселенијумских једињења. Анализа кристалографских података је показала да је у већини анализираних структура оријентација  $\text{CH}_2\text{-Se-X}$  фрагмената антипаралелна. На основу ових резултата одабрали смо пет модел система и користили их за анализу декомпозиције енергије интеракција. Резултати су показали да енергији  $\text{Se}\cdots\text{Se}$  интеракција највише доприноси дисперзија. Резултати такође сугеришу значајан допринос електростатичке компоненте која може подесити геометрију  $\text{Se}\cdots\text{Se}$  интеракција. Ови резултати могу допринети бољем разумевању природе и својстава  $\text{Se}\cdots\text{Se}$  интеракција и помоћи у дизајну материјала на бази селена.

[1] C. B. Aakeroy, D. L. Bryce, G. R. Desiraju, A. Frontera, A. C. Legon, F. Nicotra, K. Rissanen, S. Scheiner, G. Terraneo, P. Metrangolo, G. Resnati, *Pure Appl. Chem.*, **91** (2019) 1889–1892.

[2] L. Vogel, P. Wöhrer and S. M. Huber, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **58** (2018) 1880–1891.

Захвалница: Истраживање је финансијски подржано од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Уговори бр.: 451-03-47/2023-01/200026; 451-03-47/2023-01/200168)

## THEORETICAL STUDIES OF Se $\cdots$ Se INTERACTION IN CRYSTAL STRUCTURES

I. S. Veljković <sup>a</sup>, D. S. Kretić <sup>b</sup>, D. Ž. Veljković <sup>b</sup>

<sup>a</sup> University of Belgrade-Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia ; <sup>b</sup> University of Belgrade-Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia

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

Chalcogen bonding is a special type of non-covalent interaction between positively charged area of chalcogen atom called  $\sigma$ -hole and negatively charged area of other atom [1]. Chalcogen bonds in organoselenium compounds have a significant role in chemistry, biochemistry, and crystal engineering. Although moderately strong, these interactions are known to play a crucial role in maintaining the properties of selenium-based nanomaterials [2]. In addition, recent studies have found that these interactions might be essential for the biological activity of many selenium-containing drugs [2]. Here we presented a detailed analysis of crystallographic data combined with quantum chemical calculations of Se $\cdots$ Se interactions in crystal structures of organoselenium compounds. The crystallographic data analysis showed that in majority of analyzed crystal structures orientation of CH<sub>2</sub>-Se-X fragments is antiparallel. We selected five model systems based on the results of analysis of crystal structures and used them to perform the energy decomposition analysis. The results showed that dispersion contributes the most to the energy in Se $\cdots$ Se interactions. Results also suggest that the contribution of the electrostatic component is also significant and may tune the geometry of Se $\cdots$ Se interactions. These results may contribute to a better understanding of the nature and properties of Se $\cdots$ Se interactions, and aid in the design of selenium-based materials.

[1] C. B. Aakeroy, D. L. Bryce, G. R. Desiraju, A. Frontera, A. C. Legon, F. Nicotra, K. Rissanen, S. Scheiner, G. Terraneo, P. Metrangolo, G. Resnati, *Pure Appl. Chem.*, **91** (2019) 1889–1892.

[2] L. Vogel, P. Wonner and S. M. Huber, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **58** (2018) 1880–1891.

Acknowledgment: This research has been financially supported by Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia (Contract No: 451-03-47/2023-01/200026; 451-03-47/2023-01/200168)