

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXV КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**25<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Бајина Башта – Bajina Bašta  
2018.

**XXV КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**  
**Изводи радова**

**25<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**  
**Abstracts**

**Издавач - Publisher:**

– Српско кристалографско друштво  
Ђушина 7, 11000 Београд, Србија, тел./факс 2635-217  
– Serbian Crystallographic Society  
Đušina 7, 11 000 Belgrade, Serbia, phone/fax: +381 11 2635 217

**За издавача – For the publisher:**

Слађана Новаковић – Slađana Novaković

**Уредник – Editor:**

Зоран Томић – Zoran Tomić

**Технички уредник – Technical editor:**

Зоран Томић – Zoran Tomić  
Слађана Новаковић – Slađana Novaković

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 978-86-912959-4-3  
ISSN 0354-5741

**Штампа – Printing:**

COPY CENTAR, Beograd

Тираж – Copies: 100  
Београд – Belgrade  
2018.

**XXV КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**25<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:**

др Љиљана Карановић, РГФ Београд / dr Ljiljana Karanović, RGF Beograd  
др Оливера Клисурић, ПМФ Нови Сад / dr Olivera Klisurić, PMF Novi Sad  
др Срећко Трифуновић, ПМФ Крагујевац / dr Srećko Trifunović, PMF Kragujevac  
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, TMF Beograd  
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА” / dr Goran Bogdanović, INN "Vinča"  
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, RGF Beograd  
др Наташа Јовић-Орсини, ИНН „ВИНЧА” / dr Nataša Jović-Orsini, INN "Vinča"  
др Снежана Зарић, ХФ Београд / dr Snežana Zarić, HF Beograd  
др Катарина Анђелковић, ХФ Београд / dr Katarina Anđelković, HF Beograd  
др Срђан Ракић, ПМФ Нови Сад / dr Srđan Rakić, PMF Novi Sad  
др Марин Тадић, ИНН „ВИНЧА” / dr Marin Tadić, INN "Vinča"  
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, TMF Beograd  
др Предраг Вулић, РГФ Београд / dr Predrag Vulić, RGF Beograd  
др Тамара Тодоровић, ХФ Београд / dr Tamara Todorović, HF Beograd

**ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZATION COMMITTEE:**

др Слађана Новаковић, ИНН "Винча" / dr Slađana Novaković, INN "Vinča"  
др Зоран Томић, ИНН "Винча" / dr Zoran Tomić, INN "Vinča"  
др Горан Богдановић, ИНН "Винча" / dr Goran Bogdanović, INN "Vinča"  
др Мирјана Милић, ИНН "Винча" / dr Mirjana Milić, INN "Vinča"  
др Наташа Јовић-Орсини, ИНН "Винча" / dr Nataša Jović-Orsini, INN "Vinča"  
др Марко Родић, ПМФ Нови Сад / dr Marko Rodić, PMF Novi Sad  
др Виолета Николић, ИНН "Винча" / dr Violeta Nikolić, INN "Vinča"

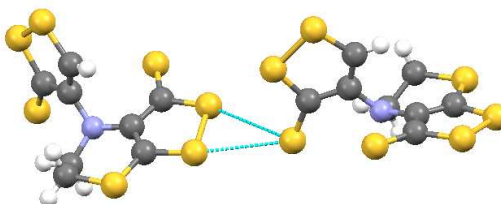
## CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF INTERACTIONS BETWEEN SULFUR AND DISULFIDE BOND

**I. S. Antonijević<sup>a</sup>, D. Ž. Veljković<sup>b</sup>, G. Sarić<sup>b</sup>, K. Katančević<sup>b</sup>, S. D. Zarić<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> 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: 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...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.