

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**28th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Чачак – Čačak
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

**28th 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

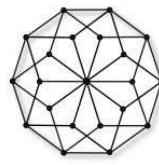
XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

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 Миливојач, ИЦХФ, Београд



SERBIAN
CRYSTALLOGRAPHIC
SOCIETY

28th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

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, Beograd
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

PARALLEL-DISPLACED INTERACTIONS BETWEEN S₈ RINGS IN CRYSTAL STRUCTURES: COMPREHENSIVE THEORETICAL STUDY

D. S. Kretić ^a, V. B. Medaković ^a, I. S. Veljković ^b

^a University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; ^b University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; e-mail: ivana.veljkovic@ihtm.bg.ac.rs

Noncovalent interactions between S₈ molecules have been observed in crystal structures obtained from the Cambridge Structural Database (CSD) and the Inorganic Crystal Structure Database (ICSD). Analysis of geometric parameters shows that S₈ molecules adopt a parallel-displaced orientation in these crystal structures, as presented in Figure 1. This relative position of the S₈ rings results in the formation of layers consisting of stacking interactions between the S₈ rings.

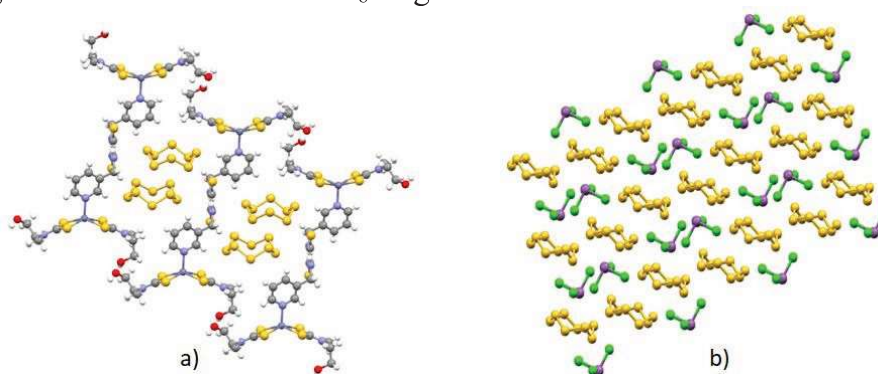


Figure 1. Parallel-displaced interactions between S₈ rings in a) HEHMOY crystal structure and b) Cl₃S₈Sb compound (ICSD ID: 35741).

Quantum chemical calculations confirm that the parallel-displaced orientation represents the most stable geometry for two S₈ molecules. The interaction in S₈ dimer is very strong with an energy of -8.70 kcal/mol, calculated on CCSD(T)/CBS level. According to the energy decomposition analysis using the SAPT 2+(3) method, the dispersion force is the main attractive force between two S₈ molecules, while the contribution of electrostatics is also significant.

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