

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.

ФЛУОРОВАЊЕ АЛИФАТИЧНИХ ЈЕДИЊЕЊА. ПОКРЕТАЧКА СИЛА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА

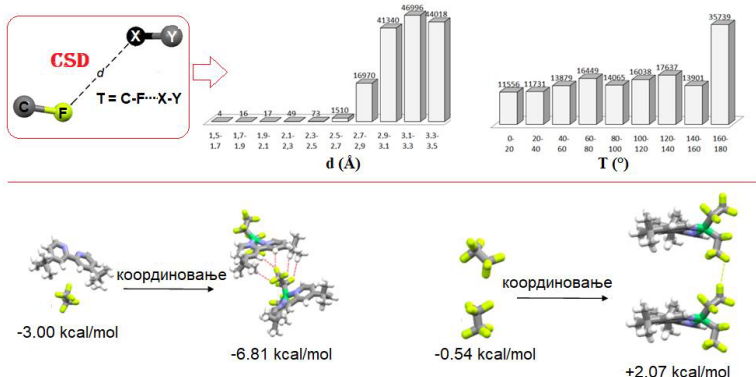
Александра Ракић,^a Марија Петковић Benazzouz,^b Немања Тришковић,^c Горан Јањић^d

^a Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија; ^b Физички факултет, Универзитет у Београду, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија; ^c Технолошко-металуришки факултет, Универзитет у Београду, Карнегијева 4, 11120 Београд, Србија; ^d Институт за хемију, технологију и металургију, Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Његошева 12, 11000 Београд, Србија;
e-mail: saska@ffh.bg.ac.rs

Флуоровање једињења повећава протон-акцепторска својства, али истовремено смањује протон-донорска својства алифатичних угљоводоничних група [1].

На основу анализе кристалних структура преузетих из Кембричке базе кристалографских података (CSD) показано је да се алифатичне C–H…F водоничне везе издвајају као најбројније интеракције флуорованих алифатичних група (43397 структура). Далеко испод (23050 структура), на другом месту су F…F интеракције. Уочљиво је да су вредности F…F растојања (*d* параметар) претежно изнад 2,9 Å. Међутим, не постоји јасно изражена тенденција према одређеној вредности *d* параметра (Слика 1). Пошто се за највећи број структура вредности торзионог угла C–F–X–Y (*T* параметар) крећу између 160 и 180° (Слика 1), може се закључити да интерагујуће C–F и X–Y групе међусобно заузимају *trans* оријентацију.

Приликом координације алифатичних флуорида, негативни потенцијал F атома расте. Тако се поспешује протон-акцепторски карактер флуоровог атома (јачање C–H/F интеракција). С друге стране, F…F интеракције значајно слабе услед јачања одбојних сила међу F атомима.



[1] G.V. Janjić, S.T. Jelić, N.P. Trišović, D.M. Popović, I.S. Đorđević, M.K. Milčić, *Crystal Growth & Design*, **20** (2020) 2943–2951.

FLUORINATION OF ALIPHATIC COMPOUNDS. DRIVING FORCE IN CRYSTAL STRUCTURES

Aleksandra Rakić,^a Marija Petković Benazzouz,^b Nemanja Trišović,^c Goran Janjić^d

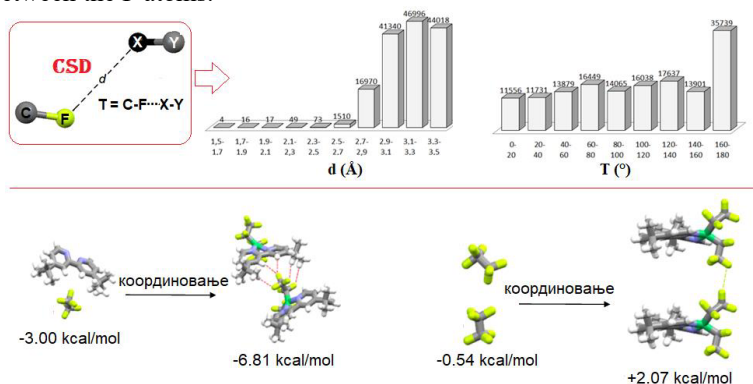
^a Faculty of Physical Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; ^b Faculty of Physics, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; ^c Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11120 Belgrade, Serbia; ^d Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; e-mail: saska@ffh.bg.ac.rs

Fluorination of compounds causes an increase in the proton-donating and a decrease in the proton-accepting ability of aliphatic groups bound to fluorine atom [1].

Statistical analysis of crystal structures from CSD (Crystallographic database) has shown the F...F contacts are the second group of interactions (23050 structures), immediately after the hydrogen bonds (43397 structures), that are mainly of aliphatic C-H...F type. There is no clear tendency of F...F contacts toward some certain values of d parameter (Figure 1), but it is possible to notice noticeable clear tendency of numerous structures to d values greater than 2.9 Å. There is a pronounced maximum in the range of torsion angle T from 160 to 180° (Figures 1), corresponding to trans orientation of interacting C-F and X-Y fragments.

Coordination of aliphatic fluorides leads to an increase of the negative potential of the F atoms, and, therefore, an increase in the hydrogen bonding acceptor ability (strengthening of C-H...F interactions) and a weakening of the F...F interactions, due to an increase in repulsive interactions between the F atoms

The negative potential of the F atoms of aliphatic fluorides increases by its coordination (Figure 1). This also leads to increase in the hydrogen bonding acceptor ability (strengthening of C-H...F interactions) and a weakening of the F...F interactions, due to an increase in repulsive interactions between the F atoms.



[1] G.V. Janjić, S.T. Jelić, N.P. Trišović, D.M. Popović, I.S. Đorđević, M.K. Milčić, *Crystal Growth & Design*, **20** (2020) 2943–2951.