

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.

FLUORINACIJA AROMATIČNIH GRUPA. EFEKAT KOORDINOVANJA NA ATOM FLUORA

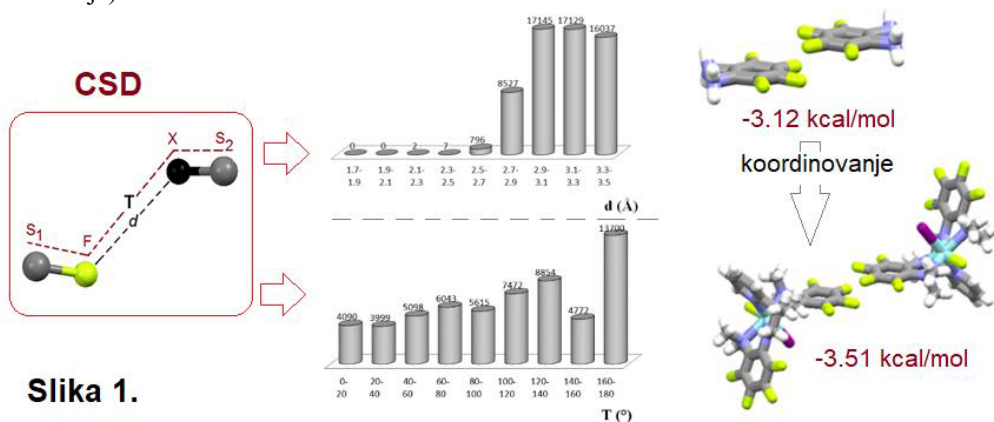
M. Petković Benazzouz^a, **A. Rakić**^b, **N. Trišović**^c, **G. Janjić**^d, **M. Sarvan**^a

^a Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 12-16, Beograd, Srbija; ^b Fakultet za fizičku hemiju, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 12-16, 11000 Beograd, Srbija; ^c Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11120 Beograd, Srbija; ^d Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerzitet u Beogradu, Njegoševa 12, Beograd, Srbija; e-mail: marijapetkovic@ff.bg.ac.rs

Zamena vodonikovog atoma atomom fluora ima značajne elektronske posledice i može dramatično da promeni osobine i supramolekulski profil jedinjenja [1].

Statistička analiza kristalnih struktura iz Kembričke baze strukturnih podataka pokazuje da su najbrojnije one strukture kod kojih je ugljenikov atom vezan za interagujući atom fluora. One u kojima je fluor vezan za aromatičnu grupu su malo manje zastupljene. Distribucija geometrijskih parametara (Slika 1) ukazuje na nedostatak jasne tendencije prema nekim određenim vrednostima parametra d . Opaža se da aromatične grupe imaju malo izraženiju tendenciju ka kraćim d rastojanjima (Slika 1) u poređenju sa kontaktima sa alkil grupama (maksimumi d rastojanja su u opsegu od 3,1 Å do 3,3 Å). U oba slučaja, strukture sa trans orijentacijom (torzioni ugao T je u opsegu od 160° do 180°) su učestalije u odnosu na strukture sa cis orijentacijom (0° < T < 160°). Brojne su i strukture sa uvijenom geometrijom (20° < T < 160°).

Efekat koordinovanja je praćen na uobičajenim C-H/F i F/F interakcijama u kristalnim strukturama fluoro-jedinjenja. Ne postoji značajna promena u elektrostatičkom potencijalu F atoma izazvana koordinovanjem aromatičnih fluorida a to rezultuje malim promenama u jačini C-H/F i F/F interakcija i приметnim jačanjem onih interakcija koje uključuju π -sisteme ((F/ π i C-H/ π interakcije).



[1] K. Gak Simić, I. Đorđević, A. Lazić, L. Radovanović, M. Petković-Benazzouz, J. Rogan, N. Trišović, G. Janjić, *CrystEngComm*, **23** (2021) 2606-2622.

FLUORINATION OF AROMATIC GROUPS. THE EFFECTS OF COORDINATION ON FLUORINE INTERACTIONS

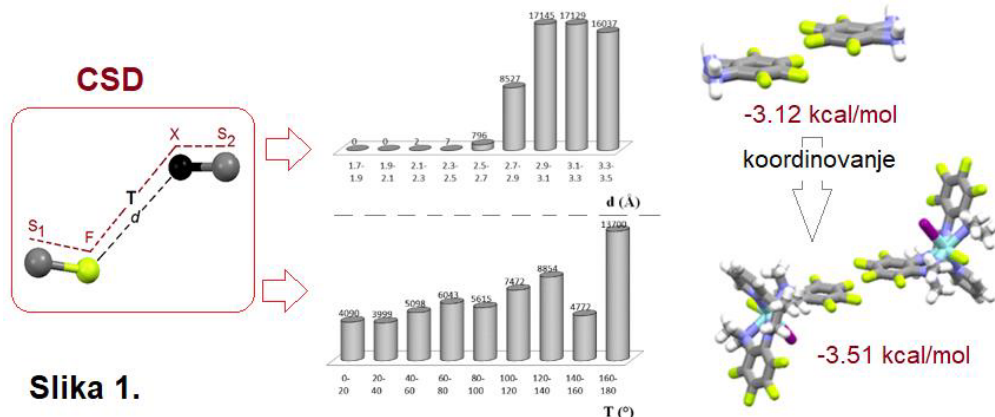
M. Petković Benazzouz^a, **A. Rakić**^b, **N. Trišović**^c, **G. Janjić**^d, **M. Sarvan**^a

^a Faculty of Physics, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; ^b Faculty of Physical Chemistry, 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: marijapetkovic@ff.bg.ac.rs

The replacement of hydrogen atom by fluorine has significant electronic consequences and can dramatically change the properties and supramolecular profile of compounds [1].

Statistical analysis of crystal structures obtained from Cambridge Structural Database (CSD) showed that the most numerous are structures in which carbon atom is bound to interacting fluorine atom. The structures in which fluorine is bound to aromatic group are slightly less represented. The distribution of geometrical parameters (Figure 1) shows that there is no clear tendency toward some certain values of d distance, however, the aromatic groups have a slightly pronounced tendency toward the shorter d distances (Figure 1) in comparison to contacts with the alkyl groups (maximum is in the range from 3.1 to 3.3 Å). In both cases, structures with trans orientation (torsional angle T is in range from 160 to 180°) are more frequent than structures with cis orientation ($0 < T < 20^\circ$). The structures with twisted geometry ($20 < T < 160^\circ$) are also very numerous.

The effect of coordination have been considered through the most common C-H/F and F/F interactions of fluoro compounds in the crystal structures. There is no a significant change in the electrostatic potential of the F atoms due to coordination of aromatic fluorides, resulting in slight changes in the strengths of the C-H/F and F/F interactions, and in noticeable enhancement of interactions involving the π -system (F/ π and C-H/ π interactions).



[1] K. Gak Simić, I. Đorđević, A. Lazić, L. Radovanović, M. Petković-Benazzouz, J. Rogan, N. Trišović, G. Janjić, *CrystEngComm*, **23** (2021) 2606-2622.