

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.

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**27th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:

др Љиљана Карановић, РГФ Београд / dr Ljiljana Karanović, FMG Belgrade
др Тамара Тодоровић, ХФ Београд / dr Tamara Todorović, FC Belgrade
др Марко Родић, ПМФ Нови Сад / dr Marko Rodić, FS Novi Sad
др Душан Велковић, ХФ Београд / dr Dušan Veljković, FC Belgrade
др Оливера Клисурић, ПМФ Нови Сад / dr Olivera Klisurić, FS Novi Sad
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, FTM Belgrade
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА” / dr Goran Bogdanović, INS "Vinča"
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, FMG Belgrade
др Братислав Антић, ИНН „ВИНЧА” / dr Bratislav Antić, INN "Vinča"
др Снежана Зарић, ХФ Београд / dr Snežana Zarić, FC Belgrade
др Катарина Анђелковић, ХФ Београд / dr Katarina Anđelković, FC Belgrade
др Срђан Ракић, ПМФ Нови Сад / dr Srđan Rakić, FS Novi Sad
др Наташа Јовић Орсини, ИНН „ВИНЧА” / dr Nataša Jović Orsini, INS "Vinča"
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, FTM Belgrade

ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZATION COMMITTEE:

др Верица Јевтић, ПМФ Крагујевац / dr Verica Jevtić, FS Kragujevac
др Гордана Радић, ФМН Крагујевац / dr Gordana Radić, FMS Kragujevac
др Аница Глођовић, ПМФ Крагујевац / dr Anica Glđović, FS Kragujevac
др Андрија Ћирић, ПМФ Крагујевац / dr Andrija Ćirić, FS Kragujevac
др Марина Ћендић Серафиновић, ПМФ Крагујевац / dr Marina Ćendić Serafinović, FS Kragujevac
др Марија Ристић, ПМФ Крагујевац / dr Marija Ristić, FS Kragujevac
др Емина Мркалић, ИИТ Крагујевац / dr Emina Mrkalić, ИТ Кragujevac
др Данијела Стојковић, ИИТ Крагујевац / dr Danijela Stojković, ИТ Кragujevac
др Едина Авдовић, ИИТ Крагујевац / dr Edina Avdović, ИТ Кragujevac
др Маја Ђукић, ПМФ Крагујевац / dr Маја Đukić, FS Kragujevac
Сандра Јовичић Милић, ПМФ Крагујевац / Sandra Jovičić Milić, FS Kragujevac
Ђорђе Петровић, ПМФ Крагујевац / Đorđe Petrović, FS Kragujevac
Маријана Касаловић, ПМФ Крагујевац / Marijana Kasalović, FS Kragujevac
Марко Радовановић, ПМФ Крагујевац / Marko Radovanović, FS Kragujevac
Игњат Филиповић, ПМФ Крагујевац / Ignjat Filipović, FS Kragujevac

ОРГАНИЗАТОРИ



СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY



ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
FACULTY OF SCIENCE
UNIVERSITY OF KRAGUJEVAC

ПОКРОВИТЕЉ



МИНИСТАРСТВО ПРОСВЕТЕ, НАУКЕ И
ТЕХНОЛОШКОГ РАЗВОЈА РЕПУБЛИКЕ СРБИЈЕ
MINISTRY OF EDUCATION, SCIENCE AND
TECHNOLOGICAL DEVELOPMENT OF THE
REPUBLIC OF SERBIA

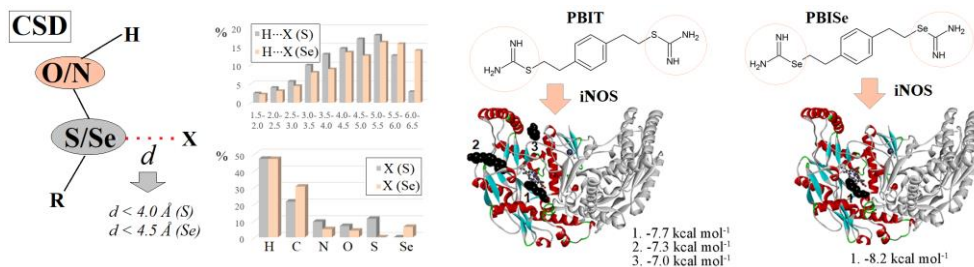
ZAMENA SUMPORA SELENOM. EFEKAT POLARNIH GRUPA IZ OKRUŽENJA

Lj. Suručić^a, T. Tadić^b, A. Nastasović^b, B. Marković^b, Z. Sandić^c, A. Onjia^d, G. Janjić^b

^aUniverzitet u Banjoj Luci, Medicinski fakultet, Save Mrkalja 14, Banja Luka, Republika Srpska, Bosna i Hercegovina; ^bUniverzitet u Beogradu – Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju – IHTM, Njegoševa 12, Beograd, Srbija; ^cUniverzitet u Banjoj Luci, Prirodno matematički fakultet, Mladena Stojanovića 2, Banja Luka, Republika Srpska, Bosna i Hercegovina; ^dUniverzitet u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija
e-mail: ljiljana.surucic@med.unibl.org

Statistička analiza podataka dobijenih iz kristalnih struktura, ekstrahovanih iz Kembričke baze strukturnih podataka (eng. CSD), pokazala je da atomi S i Se u nepolarnom okruženju pokazuju sličnu tendenciju ka pojedinim tipovima interakcija [1]. Najbrojnije su strukture sa C-H...S i C-H...Se interakcijama (~ 80%), dok su Se...Se i S...S interakcije druge po zastupljenosti (~ 5%). Kada se S ili Se nalaze u polarnom okruženju (u neposrednoj blizini imaju O-H ili N-H grupu) raspodela pojedinih tipova interakcija je nešto drugačija. Statistička analiza interakcija S i Se (kriterijumi: $d < 4.0 \text{ \AA}$ (za S) $d < 4.5 \text{ \AA}$ (za Se), Slika) pokazala je da su najbrojnije interakcije sa H atomom (u oba slučaja oko 47%), dok su interakcije koje uključuju C atome (interakcije sa nepolarnim grupama) druge po zastupljenosti. Interakcije sa nepolarnim C-H grupama su nešto zastupljenije kod Se (30%) nego kod S atoma (21%), dok su interakcije sa polarnim O-H i N-H grupama manje brojne kod Se (ukupno 10%) nego kod S atoma (ukupno 16%). Neočekivano, simultane interakcije X atoma sa S/Se atomom i polarnom O-H/N-H grupom ($H \cdots X < 3.5 \text{ \AA}$) su zastupljene u udelu od samo 20% (Slika).

Rezultati doking studije sugerišu da bi PBiSe (Se jedinjenje) moglo biti bolji inhibitor iNOS (inducibilne azot-monoksid sintaze) nego njegov S derivat (PBIT). Sve orijentacije PBiSe su grupisane na istom mestu (aktivno mesto, Slika) što dovodi do mnogo bolje efikasnosti ovog molekula u odnosu na PBIT, za kojeg su nađena tri mesta vezivanja (Slika). Ovo se slaže sa eksperimentalnim rezultatima koji ukazuju na to da PBiSe ubija ćelije melanoma više od 10 puta efikasnije od drugog iNOS inhibitora (PBIT).



[1] I. Đorđević, M. Popadić, M. Sarvan, M. Petković-Benazzouz, G. Janjić, *Acta Cryst.* **B76** (2020) 122-136.

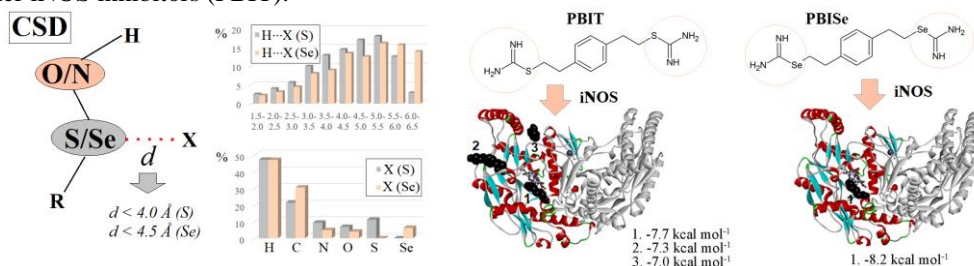
SUBSTITUTION OF SULFUR BY SELENIUM. EFFECT OF POLAR GROUPS FROM THE ENVIRONMENT

Lj. Suručić^a, T. Tadić^b, A. Nastasović^b, B. Marković^b, Z. Sandić^c, A. Onjia^d, G. Janjić^b

^aUniversity of Banja Luka, Faculty of Medicine, Save Mrkalja 14, Banja Luka, Republic of Srpska, Bosnia and Herzegovina; ^bUniversity of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, ICTM, Njegoševa 12, Belgrade, Republic of Serbia; ^cUniversity of Banja Luka, Faculty of Science, Mladena Stojanovića 2, Banja Luka, Republic of Srpska, Bosnia and Herzegovina; ^dUniversity of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, Belgrade, Republic of Serbia
e-mail: ljiljana.surucic@med.unibl.org

Statistical analysis of data from crystal structures, extracted from Cambridge Structural Database (CSD) have shown that S and Se atoms in nonpolar environment display similar tendency toward specified type interactions [1]. The most numerous are structures with C–H···Se and C–H···S interactions (~80%), while structures with Se···Se and S···S interactions (~5%) are notably less numerous (second type of interactions). When S or Se atoms is in a polar environment (there is OH or NH groups in the vicinity), the distribution of certain types of interactions is slightly different. Statistical analysis of S and Se interactions (criteria: $d < 4.0 \text{ \AA}$ (for S) $d < 4.5 \text{ \AA}$ (for Se), Figure) showed the most numerous interactions with the H atom (in both cases about 47%), while interactions involving C atoms (interactions with non-polar groups) are second in prevalence. Interactions with non-polar C-H groups are slightly more numerous for Se (30%) than for S atom (21%), while interactions with polar O-H and N-H groups are less numerous for Se (10% in total) than in case of S atom (16% in total). Unexpectedly, the simultaneous interactions of X atom with the S/Se atom and the polar OH/N-H group ($H \cdots X < 3.5 \text{ \AA}$) are only present in an amount of about 20%.

Results from docking study suggested that PBiSe (Se compound) could be better inhibitor of iNOS (inducible nitric oxide synthase) than its S derivative (PBIT). All orientations of PBiSe are clustered at the same site (active site, Figure) leading to much better efficiency of this molecule compared to PBIT, where three binding sites can be observed (Figure). This is in strong agreement with experimental results pointing that PBiSe kills melanoma cells >10-fold more effectively than other iNOS inhibitors (PBIT).



[1] I. Đorđević, M. Popadić, M. Sarvan, M. Petković-Benazzouz, G. Janjić, *Acta Cryst.* **B76** (2020) 122-136.