

Srpsko hemijsko društvo



Serbian Chemical Society

**57. savetovanje  
Srpskog hemijskog društva**

**KRATKI IZVODI  
RADOVA**

**KNJIGA RADOVA**

**57<sup>th</sup> Meeting of  
the Serbian Chemical Society**

**Book of Abstracts  
Proceedings**

**Kragujevac 18. i 19. juni 2021.  
Kragujevac, Serbia, June 18-19, 2021**

ISBN-978-86-7132-077-1

**57. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA**

*Kragujevac, 18. i 19. juni 2021.*

**KRATKI IZVODI RADOVA/KNJIGA RADOVA**

57<sup>th</sup> MEETING OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY

*Kragujevac, Serbia, June 18-19, 2021*

**BOOK OF ABSTRACTS/PROCEEDINGS**

*Izdaje / Published by*

**Srpsko hemijsko društvo / Serbian Chemical Society**

*Karnežijeva 4/III, 11000 Beograd, Srbija*

*tel./fax: +381 11 3370 467; [www.shd.org.rs](http://www.shd.org.rs), E-mail: [Office@shd.org.rs](mailto:Office@shd.org.rs)*

*Za izdavača/For Publisher*

**Dušan Sladić, predsednik Društva**

*Urednici/Editors, Dizajn korica, slog i kompjuterska obrada teksta/Cover Design, Page Making and Computer Layout*

**prof. dr Snežana RAJKOVIĆ**

**Sladana ĐORĐEVIĆ**

**Snežana RADISAVLJEVIĆ**

**Milica MEĐEDOVIĆ**

**Tina ANDREJEVIĆ**

*OnLine publikacija/OnLine publication*

*ISBN-978-86-7132-077-1*

**Naučni odbor:**

**Scientific Committee**

Ivan Gutman, *ko-predsednik/co-chair*  
Srećko Trifunović, *ko-predsednik/co-chair*  
Vesna Mišković-Stanković  
Katarina Andđelković  
Zorica Petrović  
Vladimir Beškoski  
Dušanka Milojković Opsenica  
Dragica Trivić  
Maja Gruden  
Niko Radulović  
Maja Radetić  
Zorana Ferjančić  
Zorka Stanić  
Igor Opsenica  
Boris Furtula  
Biljana Glišić  
Bojana Obradović  
Rada Petrović  
Melina Kaligasidis Krušić  
Natalija Polović  
Tanja Ćirković Veličković  
Ljiljana Vojnović Jesić  
Aleksandra Tubić  
Marijana Ačanski  
Slavica Ražić



**Organizacioni Odbor**  
**Organising Committee**

Snežana Rajković, *predsednik/chair*  
Melina Kaligasidis Krušić

Jovana Bogojeski  
Andrija Ćirić

Vladimir Mihailović  
Ivan Jakovljević  
Nenad Joksimović  
Vesna Milovanović  
Dušan Čočić

Snežana Radisavljević  
Angelina Caković  
Milica Međedović  
Marko Radovanović  
Ignjat Filipović  
Đorđe Petrović  
Slađana Đorđević  
Tina Andrejević



**Savetovanje podržalo/Supported by**

**Ministarstvo prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije**  
*Ministry of Education, Science and Technological Development of Republic of Serbia*

*Ova knjiga sadrži **67 saopštenja**  
(obima jedna stranica)  
prezentovanih na  
57. savetovanju Srpskog hemijskog društva*

*This book contains **67 Abstracts**  
presented at  
the 57<sup>th</sup> Meeting of the Serbian Chemical Society*

*Ova knjiga sadrži **6 radova**  
(obima od najmanje četiri stranice)  
pojedinih saopštenja prezentovanih na  
57. savetovanju Srpskog hemijskog društva*

*This book contains **6 Proceedings**  
of some of the contributions presented at  
the 57<sup>th</sup> Meeting of the Serbian Chemical Society*

# SADRŽAJ/CONTENTS

## Plenarna redavanja/Plenary Lectures

Asymmetric organocatalysis: stereoselective approaches to nitrogen heterocycles	19
---	----

Luca Bernardi

Pristupi u medicinskoj hemiji zasnovani na strukturi liganda (mašinskom učenju) i strukturi molekulske mete: Primena u otkrivanju lekova (i analizi esencijalnih ulja)	20
--	----

Rino Ragno

Ligand Based (Machine Learning) and Structure-Based Approaches in Medicinal Chemistry: Application to Drug Discovery (and Essential Oils)	
---	--

## Predavanja po pozivu/Invited Lectures

Steroidi u medicinskoj hemiji - hemijom i biologijom vođen razvoj lekova	23
--	----

Suzana Jovanović-Šanta

Steroids in medicinal chemistry - chemistry and biology driven drug development	
---	--

Organokatalitičke enantioselektivne C-H funkcionalizacije u prisustvu organskih oksidanata	24
--	----

Bojan Bondžić

Organocatalytic enantioselective C-H functionalizations promoted by organic oxidants	
--	--

Zamena sumpora selenom; Supramolekulski pristup	25
---	----

Goran V. Janjić

Substitution of sulfur by selenium; The supramolecular insight	
--	--

The art of structure-based drug design: Demystifying Molecular Docking	26
--	----

Milan Mladenović

Uticaj inertnog liganda na biološku aktivnost Rh(III) i Os(III) kompleksa u odsustvu i prisustvu jonskih tečnosti	27
---	----

Jovana Bogojeski

**Influence of an inert ligand on the biological activity of Rh(III) and Os(III) complexes in the absence and in presence of ionic liquids**

**Bisbibenzili, flavonolignani i flavonoidni dimeri, rasprostranjenost i biološke aktivnosti** \_\_\_\_\_ 28

Miroslav Novaković

**Bisbibenzyls, flavonolignans and flavonoid dimers, abundance and biological activity**

**Saopštenja/Contributions**

**Analitička hemija/Analytical Chemistry**

**Elektroda od ugljenične paste modifikovana jonskom tečnošću 1-butil-3-metilpiridinijum hloridom za voltametrijsko određivanje UV filtera avobenzona** \_\_\_\_\_ 30

Sanja Mutić

**Carbon paste electrode modified with ionic liquid 1-butyl-3-methylpyridinium chloride for voltammetric determination of UV filter avobenzone**

**Sadržaj ukupnih polifenola, flavonoida i derivata dihidroksicimetne kiseline u rizomu i vegetativnom delu biljke Corydalis ochroleuca** \_\_\_\_\_ 31

Aleksandar Ž. Kostić

**The content of total phenolics, flavonoids and dihydroxycinnamic acid derivatives in rhizome and vegetative parts of Corydalis ochroleuca**

**pH-Zavisna rastvorljivost nortriptilin-hidrohlorida** \_\_\_\_\_ 32

Olivera S. Marković

**pH-Dependent solubility profile of nortriptyline hydrochloride**

**Imobilizacija govedeg serum albumina na silika gelu i primena u ekstrakciji čvrstom fazom** \_\_\_\_\_ 33

Miloš P. Pešić

**Bovine serum albumin immobilization on silica gel and application in solid phase extraction**

**Optimizacija uslova za degradaciju ibuprofena pomoću hlor – dioksida \_\_\_\_\_ 34**

I. D. Kodranov

**Optimization of conditions for degradation of ibuprofen using chlorine dioxide**

**Fizička hemija/Physical Chemistry**

**LIBS kao obećavajući alat za brzu elementnu analizu humanih zuba \_\_\_\_\_ 36**

Jelena Petrović

**LIBS as a promising tool for fast elemental analysis of human teeth**

**Elektrohemija/Electrochemistry**

**Brzina korozije cevi od nerđajućih čelika izračunata pomoću elektrohemijske frekvencione modulacije \_\_\_\_\_ 38**

Dorđe Ž. Petrović

**Corrosion Rate of Stainless Steel Tubes Calculated by Electrochemical Frequency Modulation**

**Uticaj prisustva vode na koroziju Mg u etalinu \_\_\_\_\_ 39**

M. Bučko

**Water influence on Mg corrosion in ethaline**

**Aminokiseline kao zeleni inhibitori korozije AA2024-T42 legure \_\_\_\_\_ 40**

Andjela R. Simović

**Amino acids as green corrosion inhibitors for AA2024-T42 alloy**

**Primena senzora na bazi modifikovane ugljenične paste za određivanje riboflavina \_\_\_\_\_ 41**

Zorica Stojanović

**Application of the sensor based on modified carbon paste electrode as an electroanalytical approach for riboflavin determination**

**Poređenje elektrohemijskog ponašanja folne kiseline na različitim elektrohemijskim senzorima \_\_\_\_\_ 42**

Ana Đurović

**Comparison of electrochemical behavior of folic acid on different electrochemical sensors**

**Određivanje elektrohemijski aktivne površine nikal-oksi-hidroksida** \_\_\_\_\_ 43

Maja D. Obradović

**Estimation of the electrochemically active surface area of nickel-oxy-hydroxides**

**Elektrohemijска синтеза nanoчестичка сребра у хидрогеловима поливинил-алкohола и агината** \_\_\_\_\_ 44

Sofija Petković

**Electrochemical synthesis of silver nanoparticles in poly(vinyl alcohol) and alginate hydrogels**

**Optimizacija elektrohemijске синтезе nanoчестичка сребра у поливинил-алкohол/хитозан хидрогеловима помоћу експерименталних и симулirаних UV-видljivih spektara** \_\_\_\_\_ 45

Marko Opsenica

**Optimization of electrochemical synthesis of silver nanoparticles in poly(vinyl alcohol)/chitosan hydrogels using experimental and simulated UV-visible spectra**

**Bioaktivne kompozitne prevlake na titanu koje otpuštaju gentamicin** \_\_\_\_\_ 46

Ana Janković

**Bioactive Gentamicin-Eluting Composite Coatings on Titanium**

**Hemijsko inženjerstvo/Chemical Engineering**

**Termodinamička svojstva i modelovanje međumolekulske interakcije dvokomponentne smeše limonena i hloroforma** \_\_\_\_\_ 48

Milana M. Zarić

**Thermodynamic properties and modeling intermolecular interaction of binary mixture of limonene and chloroform**

**Eksperimentalno određivanje gustina linalola, alfa-pinena i beta-pinena na visokom pritisku** \_\_\_\_\_ 49

Zoran Simić

**Experimental determination of linalool,  $\alpha$ -pinene and  $\beta$ -pinene densities at high pressure**

**Tekstilno inženjerstvo/Textile Engineering**

**Antimikrobnna aktivnost nanolistića CuO *in situ* sintetisanih na pamučnoj tkanini prethodno oksidisanoj sa NaIO<sub>4</sub>/NaClO<sub>2</sub>** \_\_\_\_\_ 51

Darka Marković

**Antimicrobial activity of CuO nanosheets *in situ* synthesized on cotton fabric previously oxidized with NaIO<sub>4</sub>/NaClO<sub>2</sub>**

**Sposobnost jednosmernog upravljanja tečnošću glatkih DL pletenina** \_\_\_\_\_ 52

Milada Novaković

**Unidirectional liquid management properties of plain weft knitted fabrics**

**Hemija materijala/Material Science**

**Sinteza i karakterizacija hidrougljeva dobijenih iz drvne biomase** \_\_\_\_\_ 54

Mirjana Petronijević

**Synthesis and characterization of wood-derived hydrochars**

**Morfološka i elektrohemiska karakterizacija nanočestica srebra i gvožđe-oksida namenjenih za elktroanalizu** \_\_\_\_\_ 55

Bojana B. Laban

**Morphological and electrochemical characterization of silver and iron-oxide nanoparticles intended for electroanalysis**

**Bio-sinteza nanočestica magnetita primenom vodenih ekstrakata cveta biljke *Sambucus ebulus L.*** \_\_\_\_\_ 56

Mirjana Ž. Petronijević

**Bio-synthesis of magnetite nanoparticles using *Sambucus ebulus* flower water extract**

**Neorganska hemija/Inorganic Chemistry**

**Ispitivanje supstitucionih reakcija kompleksa Pd(II) sa biološki značajnim ligandima** \_\_\_\_\_ 58

Snežana R. Radisavljević

**Study of the substitution reactions between Pd(II) complexes and biologically significant ligands**

<b>Kompleksi platine(II) sa malonskom kiselinom: Sinteza, karakterizacija i interakcije sa DNK</b>	<b>59</b>
--	-----------

Andjela A. Franich

<b>Platinum(II) complexes with malonic acid: Synthesis, characterization and interactions with DNA</b>	
--	--

<b>In-vitro ispitivanje interakcija dva strukturno slična kompleksa Šifovih baza Rh(III) sa HSA/DNK i molekulski doking</b>	<b>60</b>
---	-----------

Aleksandar Mijatović

<b>In-vitro investigation of interaction of two structurally similar Schiff base Rh(III) complexes with HSA/DNA and molecular docking</b>	
---	--

<b>Antimikrobna aktivnost platine(IV) kompleksa sa <i>O,O'</i>-dialkil estrima (<i>S,S</i>)-etilenediamin-<i>N,N'</i>-di-2-(4-metil)-pentanske kiseline</b>	<b>61</b>
---	-----------

Jelena M. Mašković

<b>Antimicrobial activity of platinum(IV) complexes with <i>O,O'</i>-dialkyl esters of (<i>S,S</i>)-ethylenediamine-<i>N,N'</i>-di-2-(4-methyl)-pentanoic acid</b>	
--	--

<b>Sinteza i karakterizacija jedinjenja trifenilkalaja(IV) sa 3-(4-metil-2-oksohinolinil)propanskom kiselinom</b>	<b>62</b>
---	-----------

Marijana P. Kasalović

<b>Synthesis and characterization of novel triphenyltin(IV) compound with 3-(4-methyl-2-oxoquinolinyl)propanoic acid</b>	
--	--

<b>Sinteze i kristalne strukture semikarbazona pirogroatane kiseline i njegovog kompleksa sa bakar(II) bromidom</b>	<b>63</b>
---	-----------

Marko V. Rodić

<b>Synthesis and crystal structures of pyruvate semicarbazone and its copper(II) bromide complex</b>	
--	--

### **Hemija životne sredine/Environmental Chemistry**

<b>Uklanjanje hroma(VI) iz vode primenom praškastog ugljeničnog materijala dobijenog iz kokosove ljuške kao jeftinog adsorbenta</b>	<b>65</b>
---	-----------

Katarina Stanković

**Chromium(VI) removal from aqueous solutions using powdered coconut shell activated carbon as a low-cost adsorbent**

**Efikasnost fotokatalitičke razgradnje odabranih herbicida primenom simuliranog sunčevog zračenja** \_\_\_\_\_ 66

Nataša J. Zec

**Efficiency of photocatalytic degradation of selected herbicides using simulated solar light**

**Sadržaj i distribucija teških metala u reci Ibar tokom poplava i izlivanja jalovišta** \_\_\_\_\_ 67

Ružica Micić

**Content and distribution of heavy metals in the river Ibar during floods and spills of mine tailings**

**Suncokretova ljeska kao biosorbent za uklanjanje teških metala iz vodenih rastvora** \_\_\_\_\_ 68

Sanja Živković

**Removal of heavy metals from aqueous solutions by using sunflower husk as biosorbent**

**Predviđanje koeficijenta zadržavanja teških metala iz otpadnih voda kompleksirajuće-mikrofiltracionim procesom u prisustvu aminokiselina primenom veštačkih neuronskih mreža** \_\_\_\_\_ 69

Zoran Sekulić

**Prediction of the retention coefficient of heavy metals from wastewater by complexing-microfiltration process in the presence of amino acids using artificial neural networks**

**Biohemija/Biochemistry**

**Fluorescentno obeležavanje albumina govedeg seruma fikocijanobilinom korišćenjem Trautovog reagensa** \_\_\_\_\_ 71

Mirjana Radomirović

**Fluorescent labeling of bovine serum albumin with phycocyanobilin using Traut's reagent**

**Antimikrobn i fotokatalitički potencijal nanočestica srebra sintetisanih pomoću ekstrakta biljke *Salvia verticillata* L.** \_\_\_\_\_ 72

Nikola Srećković

**The antimicrobial and photocatalytic potential of synthesized silver nanoparticles using *Salvia verticillata* L. plant extract**

**Katinoni kao stimulatori 5-HT<sub>2A</sub>R receptora: Definisanje bioaktivnih konformacija zasnovanih na strukturi receptora i 3-D QSAR profila kao načina za razumevanje njihovog ponašanja kao zloupotrebljavnih droga i dizajn anti-katinona** \_\_\_\_\_ 73

Nevena Tomašević

**Cathinones as 5-HT<sub>2A</sub>R stimulators: Definition of structure-based bioactive conformations and 3-D QSAR profiles as a pathway for understanding their behavior as abusing drugs and design of anti-cathinones**

**Hemija i tehnologija makromolekula/Chemistry and Technology of Macromolecules**

**Kinetika i modelovanje procesa uklanjanja odabranih tekstilnih boja iz otpadnih voda** \_\_\_\_\_ 75

Ksenija Milošević

**Kinetics and modeling of the process of removing selected textile dyes from wastewater**

**Sinteza multifunkcionalnih kuglica hitozana za prečišćavanje otpadnih voda** \_\_\_\_\_ 76

Melina Kalagasisidis Krušić

**Synthesis of multifunctional chitosan beads for wastewater treatment**

**Detekcija i identifikacija mikroplastike iz sedimenata međunarodnih reka u Srbiji** \_\_\_\_\_ 77

Sanja Šešlija

**Detection and identification of microplastics from the sediments of international rivers in Serbia**

**Medicinska hemija/Medicinal Chemistry**

**Derivati pirazolona: sinteza, antioksidativna aktivnost i molekularni doking sa S i M<sup>Pro</sup> proteinima virusa SARS-CoV-2** \_\_\_\_\_ 79

Jovica Branković

**Pyrazolone derivatives: synthesis, antioxidant activity, and binding to S and M<sup>Pro</sup> proteins of SARS-CoV-2 inferred by molecular docking**

**Interakcije novosintetisanih rutenijum-tpy kompleksa sa DNK i HSA** \_\_\_\_\_ 80

Milica G. Međedović

**Interactions of newly synthesized ruthenium-tpy complexes with DNA and HSA**

**Hemoinformatička analiza hinolinskih derivata aromatičnih i heterocikličnih sulfonamida kao inhibitora karboanhidraze I i II** \_\_\_\_\_ 81

Budimir S. Ilić

**Chemoinformatics investigation of quinoline derivatives of aromatic and heterocyclic sulfonamides as inhibitors of carbonic anhydrase I and II**

**Ključni intermedijeri u sintezi protulaktona A** \_\_\_\_\_ 82

Sanja Đokić

**Key intermediates in protulactone A synthesis**

**Novi defenilovani analog kardiobutanolida: sinteza, antiproliferativna aktivnost i SAR ispitivanja** \_\_\_\_\_ 83

Jelena D. Kesić

**A novel dephenylated cardiobutanolide analogue: synthesis, antiproliferative activity and SAR study**

**Sinteza i antitumorska aktivnost defenilovanih 5,7-di-O-metil analoga goniofufurona** \_\_\_\_\_ 84

Jovana Francuz

**Synthesis and antitumour activity of dephenylated 5,7-di-O-methyl goniofufurone analogues**

**Sinteza, citotoksičnost i SAR analiza novih analoga (-)-murikatacina** \_\_\_\_\_ 85

Sladjana M. Kekezović

**Synthesis, cytotoxicity and SAR analysis of novel (–)-muricatacin analogues**

**Sinteza i biološko profilisanje (+)-JQ1 amida kao BET inhibitora** \_\_\_\_\_ 86

Mladen Koravović

**Synthesis and biological profiling of (+)-JQ1 amides as BET inhibitors**

**Organska hemija/Organic Chemistry**

**Sinteza i antikancerski potencijal 4-azolilkumarina** \_\_\_\_\_ 88

Milena Simić

**Synthesis and anticancer potential of 4-azolylcoumarins**

**Sinteza i *in silico* ADME analiza novih steroidnih tiazolidinonskih derivata** \_\_\_\_\_ 89

Tijana Šestić

**Synthesis and *in silico* ADME analysis of new steroid thiazolidinone derivatives**

**Ukrštena Rauhut-Currier-ova reakcija 1-frocenil-2-nitroetilena sa vinil-ketonima** \_\_\_\_\_ 90

Dragana Stevanović

**Cross Rauhut-Currier reaction of 1-ferrocenyl-2-nitroethylene with vinyl ketones**

**Komparativna studija antioksidativne aktivnosti boja i obojene tkanine: 5-(4-supstituisani fenilazo)-3-piridinium-6-hidroksi-4-metil-2-piridonii** \_\_\_\_\_ 91

Aleksandra Mašulović

**Comparative study of the antioxidant activity of dyes vs. dyestuff: 5-(4-substituted phenylazo)-3-pyridinium-6-hydroxy-4-methyl-2-pyridones**

**DNK interakcije 17-supstituisanih A-modifikovanih androstanskih derivata** \_\_\_\_\_ 92

Nezrina Kurtanović

**DNA interactions of 17-substituted A-modified androstane derivatives**

**Улога интермолекулских интеракција у супрамолекулској организацији и биолошком препознавању деривата спирохидантоина** \_\_\_\_\_ 93

Немања П. Тришовић

**Role of intermolecular interactions in the self-assembly and biorecognition of a spirohydantoin derivative**

**Sinteza derivata 6,7-dihidro-5H-pirano[3,2-d]tiazol-2-amina** \_\_\_\_\_ 94

Pavle A. Stojković

**Synthesis of 6,7-dihydro-5H-pyrano[3,2-d]thiazol-2-amine derivates**

**Teorijska hemija/Theoretical Chemistry**

**Korelacija eksperimentalnih podataka sa teorijskim predviđanjem sorpcije jona teških metala na makroporoznom amino-funkcionalizovanom sorbentu** \_\_\_\_\_ 96

Ljiljana Suručić

**Correlation of experimental data and theoretical predictions of heavy metal sorption by macroporous amino-functionalized sorbent**

**Jake vodonične veze koordinovanog molekula amonijaka** \_\_\_\_\_ 97

Jelena M. Živković

**Strong Hydrogen bonds of coordinated ammonia molecules**

**Улога нековалентних интеракција у модификовању особина високоенергетских материјала** \_\_\_\_\_ 98

Душан Ж. Вељковић

**Role of non-covalent interactions in modification of properties of high energetic materials**

**Steking interakcije između *p*-cimen liganada u polusendvič-jedinjenjima rutenijuma(II)** \_\_\_\_\_ 99

Dušan P. Malenov

**Stacking interactions between *p*-cymene ligands in ruthenium(II) half-sandwich compounds**

**Podešavanje magnetno indukovanih gustina struja u Li klasterima** \_\_\_\_\_ 100

Slađana Đorđević

**Modulating the magnetically induced current density in monocyclic Li clusters**

**KNJIGA RADOVA/PROCEEDINGS**

**Analitička hemija/Analytical Chemistry**

Optimizacija uslova za degradaciju iboprufena pomoću hlor – dioksida	102
--	-----

I. D. Kodranov

Optimization of conditions for degradation of ibuprofen using chlorine dioxide	
--	--

**Elektrohemija/Electrochemistry**

Brzina korozije cevi od nerđajućih čelika izračunata pomoću elektrohemijske frekvencione modulacije	108
---	-----

Dorđe Ž. Petrović

Corrosion Rate of Stainless Steel Tubes Calculated by Electrochemical Frequency Modulation	
--	--

**Hemijsko inženjerstvo/Chemical Engineering**

Termodinamička svojstva i modelovanje međumolekulske interakcije dvokomponentne smeše limonena i hloroform-a	115
--	-----

Milana M. Zarić

Thermodynamic properties and modeling intermolecular interaction of binary mixture of limonene and chloroform	
---	--

Eksperimentalno određivanje gustina linalola, alfa-pinena i beta-pinena na visokom pritisku	121
---	-----

Zoran Simić

Experimental determination of linalool, $\alpha$ -pinene and $\beta$ -pinene densities at high pressure	
---	--

**Tekstilno inženjerstvo/Textile Engineering**

Sposobnost jednosmernog upravljanja tečnošću glatkih pletenina	DL 129
--	-----------

Milada Novaković

Unidirectional liquid management properties of plain weft knitted fabrics	
---	--

**Hemija životne sredine/Environmental Chemistry**

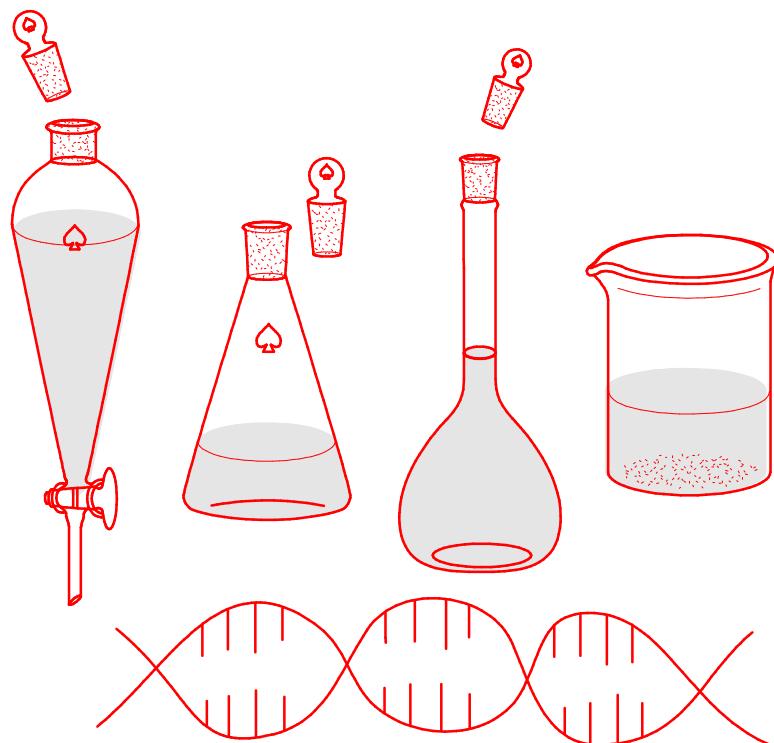
**Uklanjanje hroma(VI) iz vode primenom praškastog ugljeničnog materijala  
dobijenog iz kokosove ljske kao jeftinog adsorbenta\_\_\_\_\_136**

Katarina Stanković

**Chromium(VI) removal from aqueous solutions using powdered coconut shell  
activated carbon as a low-cost adsorbent**

## *Organska hemija*

## *Organic Chemistry*



## ОН-Р-6

### Улога интермолекулских интеракција у супрамолекулској организацији и биолошком препознавању деривата спирохидантоина

Анита М. Лазић, Ивана С. Ђорђевић,\* Лидија Д. Радовановић, Драган М. Поповић,\* Јелена Р. Роган,\*\* Горан В. Јањић,\* Немања П. Тришовић

Синтетисан је рацемски дериват спирохидантоина, који поседује тетралинску и 4-метоксибензил-групу, а затим је одређена његова кристална структура. Хијерархијски развој кристалног паковања дискутован је са аспекта кооперативности хомо- и хетерохиралних димерних мотива који одражавају различите интермолекулске интеракције. Специфична структурна карактеристика проучаваног једињења јесу наизменично постављени двоструки слојеви. Велики број контактних фрагмената у окружењу тетралинске групе представља последицу веће контактне површине. Са друге стране, 4-метоксибензил-група обезбеђује већи допринос укупној стабилизацији. Што се тиче фармаколошког потенцијала проучаваног једињења, извршена је симулација везивања молекула за допамински рецептор D3 и ензим IRAK 4 (eng. Interleukin-1 Receptor-Associated Kinase 4). Укупан број аминокиселинских остатака који ступају у интеракцију са 4-метоксибензил-групом је нешто већи од броја аминокиселинских остатака у окружењу тетралинске групе. Услед веће флексибилности, 4-метоксибензил-група се лакше адаптира за успостављање интеракција са биолошким циљевима.

### Role of intermolecular interactions in the self-assembly and biorecognition of a spirohydantoin derivative

Anita M. Lazić, Ivana S. Đorđević,\* Lidija D. Radovanović, Dragan M. Popović,\* Jelena R. Rogan,\*\* Goran V. Janjić,\* Nemanja P. Trišović\*\*

*Innovation Center of the Faculty of Technology and Metallurgy, Kardex 4, 11120 Belgrade, Serbia \*University of Belgrade-Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Department of Chemistry, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Republic of Serbia \*\*Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Kardex 4, 11120 Belgrade, Serbia*

A racemic spirohydantoin derivative bearing a tetralin and 4-methoxybenzyl group was synthesized and its crystal structure was determined. The hierarchical development of the crystal packing was discussed through cooperativity of various homo and heterohiral dimeric motifs associated with the presence of different intermolecular interactions. A hallmark structural feature of the investigated compound was alternation of double layers. A larger number of the contact fragments in the environment of the tetralin unit results from its larger contact surface, while the 4-methoxybenzyl unit provides a slightly greater contribution to the overall stabilization. Regarding the pharmacological potential of the investigated compound, we performed a docking study on the dopamine D3 receptor and IRAK 4 (Interleukin-1 Receptor-Associated Kinase 4) enzyme. The total number of amino acid, which interact with the 4-methoxybenzyl unit, was slightly larger than the number of amino acids in the neighborhood of the tetralin unit as a result of its greater flexibility. It made the 4-methoxybenzyl unit more adaptable for interactions with the biological targets.

*This work was supported by the Ministry of Education, Science and Technological Development of the Republic of Serbia (Contract No. 451-03-9/2021-14/200135; 451-03-9/2021-14/200287, 451-03-9/2021-14/200026).*