

Srpsko hemijsko društvo



Serbian Chemical Society

**57. savetovanje
Srpskog hemijskog društva**

**KRATKI IZVODI
RADOVA
KNJIGA RADOVA**

**57th 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

57th 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

Karnegijeva 4/III, 11000 Beograd, Srbija

tel./fax: +381 11 3370 467; www.shd.org.rs, E-mail: 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 Anđelković
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 Kalagasidis Krušić
Natalija Polović
Tanja Ćirković Veličković
Ljiljana Vojnović Ješić
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 Ćočić
Snežana Radisavljević
Angelina Caković
Milica Međedović
Marko Radovanović
Ignjat Filipović
Đorđe Petrović
Sladana 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 57th 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 57th Meeting of the Serbian Chemical Society*

ОН-Р-6

Улога интермолекулских интеракција у супрамолекулој организацији и биолошком препознавању деривата спирохидантоина

Анита М. Лaziћ, 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, Karnegijeva 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, Karnegijeva 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 heterochiral 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).