

Српско хемијско друштво



Клуб младих хемичара Србије

ПРВА КОНФЕРЕНЦИЈА МЛАДИХ ХЕМИЧАРА СРБИЈЕ

ПРОГРАМ И КРАТКИ ИЗВОДИ РАДОВА



Београд, 19. и 20. октобар 2012.

CIP - Каталогизација у публикацији
Народна библиотека Србије, Београд

54(048)
577.1(048)
60(048)
66.017/.018(048)

КОНФЕРЕНЦИЈА Младих хемичара Србије (1 ; 2012 ; Београд)

Програм и кратки изводи радова / Прва конференција младих хемичара Србије, Београд, 19. и 20. октобар 2012. ; [уредници Игор Опсеница, Александар Декански]. - Београд : Српско хемијско друштво, 2012 (Београд : Развојно-истраживачки центар графичког инжењерства ТМФ). - IX, 121 стр. : граф. прикази ; 24 cm

На врху насл. стр.: Клуб младих хемичара Србије. - Упоредо срп. текст и енгл. превод. - Текст ћир. и лат. - Тираж 150.

ISBN 978-86-7132-050-4

а) Хемија - Апстракти б) Биохемија - Апстракти с) Биотехнологија - Апстракти
д) Наука о материјалима - Апстракти
COBISS.SR-ID 194007308

**ПРВА КОНФЕРЕНЦИЈА МЛАДИХ ХЕМИЧАРА СРБИЈЕ
БЕОГРАД 19-20. ОКТОБАР 2012.**

ПРОГРАМ И КРАТКИ ИЗВОДИ РАДОВА

Издаје

Српско хемијско друштво

Карнеијева 4/III, 11000 Београд, Србија

тел./факс: +381 11 3370 467; www.shd.org.rs, Е-пошта: Office@shd.org.rs

За издавача

Иванка ПОПОВИЋ, председник Друштва

Уредници

Игор ОПСЕНИЦА

Александар ДЕКАНСКИ

Дизајн корица, слој и компјутерска обрада шекста

Александар ДЕКАНСКИ

Тираж

150 примерака

ISBN 978-86-7132-050-4

Штамп / Принтинт

Развојно-истраживачки центар графичког инжењерства

Технолошко-металушки факултет

Карнеијева 4, Београд, Србија

XC П02

Conformational preferences of 2-[(2-hydroxyethyl)sulfanyl]-4-oxo-4-(2,4-diisopropylphenyl)-butanoic acid phenylamide. The NMR/MD study

Ilija N. Cvijetić, Maja D. Vitorović-Todorović*, Ivan O. Juranić**, Branko J. Drakulić**
Innovation Center of the Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski Trg 12-16, Belgrad,
**Military-Technical Institute, Ratka Resanovića 1, Belgrade,*
***Department of Chemistry-IChTM, University of Belgrade, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia*

Title molecule, recently prepared in our laboratory comprises the pharmacophoric pattern of the BH3 domain inhibitors. Such compounds were extensively studied as the antiproliferative agents. In this communication we present its conformational preferences in the solvents of different polarity and HBD/HBA abilities. NOESY spectra of compound were recorded in DMSO- d_6 and $CDCl_3$. NOESY cross-peaks and coupling constants were processed by NAMFIS analysis and results compared with the conformational assembly and the free-energy surfaces of compound obtained by molecular dynamics simulations in the corresponding explicit solvents. Adaptive biasing force was used to map free-energy surfaces. Janocchio program was used for the NAMFIS analysis, molecular dynamics simulations (30 ns, each) were performed in NAMD 2.9 using CHARMM22 force field on the multi-node Linux cluster. Conformations of the compound were generated by OMEGA program.

Acknowledgement: This work was supported by Ministry of Education and Science of Republic of Serbia, under Grant 172035. The computational work reported makes use of results produced by the High-Performance Computing Infrastructure for South East Europe's Research Communities (HP-SEE), a project co-funded by the European Commission (under Contract No 261499) through the Seventh Framework Programme HP-SEE (<http://www.hp-see.eu/>).

Proučavanje preferentnih konformacija fenilamida 2-[(2-hidroksietil)sulfanil]-4-okso-4-(2,4-diizopropilfenil)butanske kiseline simulacijama molekulske dinamike i NMR spektroskopijom

Ilija N. Cvijetić, Maja D. Vitorović-Todorović*, Ivan O. Juranić**, Branko J. Drakulić**
Inovacioni centar, Hemijski Fakultet, Univerzitet u Beogradu, Studentski Trg 12-16, Beograd,
**Vojno-Tehnički Institut, Ratka Resanovića 1, Beograd,*
***Centar za hemiju-IHTM, Univerzitet u Beogradu, Njegoševa 12, Beograd, Srbija*

Proučavani molekul ima elemente farmakofore inhibitora BH3 domena. Takvi molekuli su antiproliferativni agensi. U ovoj komunikaciji su predstavljene preferentne konformacije jedinjenja u rastvaračima različite polarnosti i sposobnosti stvaranja vodoničnih veza. Informacije dobijene iz NOESY i 1H NMR spektara su poređene sa površinama potencijalne energije izračunatim simulacijama molekulske dinamike u različitim eksplicitnim rastvaračima.