

**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*

*Karnegijeva 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 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 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*

### PPP-3

## Zamena sumpora selenom; Supramolekulski pristup

Goran V. Janjić

*Univerzitet u Beogradu, Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Institut od nacionalnog značaja, Njegoševa 12, Beograd, Srbija*

Supramolekulski pristup zasnovan je na statističkoj analizi podataka dobijenih iz kristalnih struktura, ekstrahovanih iz CSD-a (od eng. Cambridge Structural Database), kvantno-hemijskim proračunima za procenu jačine tipičnih interakcija, i na doking studiji za određivanje vezivanja S/Se jedinjenja za odabrane biomolekule. Statistička analiza je pokazala da atomi S i Se, u fragmentima koji odgovaraju bočnim lancima cisteina (Cis), metionina (Met), selenocisteina (Sec) i selenometionina (Mse), pokazuju sličnu tendenciju ka određenim vrstama interakcija. Najbrojnije su strukture sa C-H/Se i C-H/S interakcijama (~80%). Strukture sa Se/Se i S/S interakcijama su znatno manje zastupljene u kristalnim strukturama (~5%), iako su C-H/Se i C-H/S interakcije (~ -0,8 kcal/mol) slabije od najstabilnijih Se/Se i S/S interakcija sa paralelnih orijentacijom (~ -3,3 kcal/mol) i njihovih elektrostatičkih interakcija  $\sigma/\pi$  tipa (~ -2,6 kcal/mol). Značajna razlika u brojnosti može se objasniti obiljem C-H grupa u analiziranim kristalnim strukturama. Doking studija je pokazala da S i Se atomi retko uključeni u interakcijama sa amino-kiselinskim ostacima ciljanih enzima, ali su razlike u broju i položajima vezivnih mesta izraženije ako su supstituenti vezani za S/Se polarni, ali i ako ligand poseduje više od jednog Se ili S atoma.

## Substitution of sulfur by selenium; The supramolecular insight

Goran V. Janjić

*University of Belgrade - Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia*

The supramolecular approach is based on statistical analysis of data from crystal structures extracted from the Cambridge Structural Database (CSD), quantum-chemical calculations for assess the strength of typical interactions, and docking study for determination of the binding of S/Se compounds to selected biomolecules. The statistical analysis has shown that S and Se atoms, in fragments that corresponds to the side chains of cysteine (Cys), methionine (Met) selenocysteine (Sec) and selenomethionine (Mse), display a similar tendency towards specific types of interaction. The most numerous are structures with C-H/Se and C-H/S interactions (~80%). The structures with Se/Se and S/S interactions are notably less numerous (~5%), although the C-H/Se and C-H/S interactions (~-0.8 kcal/mol) are weaker than the most stable parallel Se/Se and S/S interactions (~-3.3 kcal/mol) and electrostatic interactions of  $\sigma/\pi$  type (~-2.6 kcal/mol). The significant difference in numerosity can be explained by the abundance of C-H groups in analyzed crystal structures. Docking studies revealed that S and Se rarely participate in interactions with the amino acid residues of target enzymes, but the differences in the number and positions of their binding sites between Se and S compounds are more pronounced if the substituents of S/Se atom are polar and if there are more Se/S atoms in the ligand.

*The author would like to thank the Ministry of Education, Science and Technological Development of Republic of Serbia (Grant No: 451-03-9/2021-14/200026) for financial support.*