

Srpsko hemijsko društvo
Serbian Chemical Society



Klub Mladih hemičara Srbije
Serbian Young Chemists' Club



**54. SAVETOVANJE
SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA**

**5. KONFERENCIJA
MLADIH HEMIČARA SRBIJA**

**KRATKI IZVODI
i
KNJIGA RADOVA**

**54th MEETING OF
THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY**

**5th Conference of
Young Chemists of Serbia**

**Book of Abstracts
and
Proceedings**

**Beograd 29. i 30. septembar 2017.
Belgrade, Serbia, September 29 and 30, 2017**

CIP - Каталогizacija u publikaciji
Nародна библиотека Србије, Београд

54(082)(0.034.2)
577.1(082)(0.034.2)
66(082)(0.034.2)
66.017/.018(082)(0.034.2)
502/504(082)(0.034.2)

СРПСКО хемијско друштво. Саветовање (54 ; 2017 ; Београд)

Kratki izvodi [Електронски извор] ; i Knjiga radova = Book of Abstracts ; and Proceedings / 54. savetovanje Srpskog hemijskog društva [i] 5. konferencija mladih hemičara Srbije, Beograd 29. i 30. septembar 2017. = 54th Meeting of the Serbian Chemical Society [and] 5th Conference of Young Chemists of Serbia, Belgrade, Serbia, September 29 and 30, 2017 ; [organizatori] Srpsko hemijsko društvo [i] Klub mladih hemičara Srbije = [organizers] Serbian Chemical Society [and] Serbian Young Chemists' Club ; [urednici, editors Dragana Milić, Aleksandar Dekanski]. - Beograd : Srpsko hemijsko društvo = Serbian Chemical Society, 2017 (Beograd : Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva TMF). - 1 elektronski optički disk (CD-ROM) ; 12 cm

Sistemski zahtevi: Nisu navedeni. - Nasl. sa naslovnog ekrana. - Uporedo srp. tekst i engl. prevod. - Tekst ćir. i lat. - Tiraž 130. - Bibliografija uz pojedine radove.

ISBN 978-86-7132-067-2

1. Konferencija mladih hemičara Srbije (5 ; 2017 ; Београд) а) Хемија - Зборници б) Биохемија - Зборници с) Технологија - Зборници д) Наука о материјалима - Зборници е) Животна средина - Зборници
COBISS.SR-ID 245669388

54. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA I

5. KONFERENCIJA MLADIH HEMIČARA SRBIJA

Beograd 29. i 30. septembar 2017.

KRATKI IZVODI I KNJIGA RADOVA

54th MEETING OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY and

5th CONFERENCE OF YOUNG CHEMISTS OF SERBIA

Belgrade, Serbia, September 29 and 30, 2017

BOOK OF ABSTRACTS and 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

Živoslav TEŠIĆ, predsednik Društva

Urednici / Editors

Dragana Milić

Aleksandar DEKANSKI

Dizajn korica, slog i kompjuterska obrada teksta

Cover Design, Page Making and Computer Layout

Aleksandar DEKANSKI

Tiraž / Circulation

130 primeraka / 130 Copy Printing

ISBN 978-86-7132-067-2

Štampa / Printing

Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva, Tehnološko-metalurški fakultet,
Karnegijeva 4, Beograd, Srbija

Naučni Odbori
Scientific Committees

54th SCS Meeting

Dragana Milić, chair
Biljana Abramović
Goran Bošković
Marija Gavrović Jankulović
Maja Gruden
Ivan Gutman
Miloš Đuran
Branimir Jovančićević
Vladislava Jovanović
Melina Kalagasidis Krušić
Zorica Knežević
Gordana Ćirić-Marjanović
Bojana Obradović
Rada Petrović
Mirjana Popsavin
Maja Radetić
Niko Radulović
Slavica Ražić

5th Conference of YCS

Tamara Todorović
Igor Opsenica



Organizacioni Odbori
Organising Committees

54th SCS Meeting

Živoslav Lj. Tešić, chair
Rada Baošić
Melina Kalagasidis Krušić
Igor Opsenica
Marija Lučić Škorić

5th Conference of YCS

Života Selaković
Vuk Filipović
Jelena Radivojević

Svetovanje je podržalo / Supported by



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

Ipitivanje konformacionih promena sirtuina 2 primenom simulacija molekulske dinamike

Nemanja B. Đoković, Jonna K. Tyni*, Katarina Nikolić, Danica Agbaba,
Maija Lahtela-Kakkonen*

*Katedra za farmaceutsku hemiju, Farmaceutski fakultet, Univerzitet u Beogradu,
Beograd, Srbija*

**School of Pharmacy (Pharmaceutical Chemistry), University of Eastern Finland,
Kuopio, Finland*

Sirtuin 2 (Sirt2) se poslednjih godina sve više povezuje sa patogeneozom kancera, neurodegeneracijom i inflamacijom zbog čega predstavlja atraktivan target za razvoj novih lekova. Većina do danas okarakterisanih inhibitora Sirt2 ne poseduje odgovarajuću aktivnost i/ili selektivnost. Kristalografske strukture objavljene u poslednjih par godina obezbedile su određeni pomak u razvoju novih inhibitora, međutim i dalje postoje nedoumice u vezi sa mehanizmom inhibicije koje su posledica visoke konformacione fleksibilnosti Sirt2 enzima. U cilju sticanja detaljnijeg uvida u konformacionu fleksibilnost Sirt2, izvedeno je sedamnaest simulacija molekulske dinamike u trajanju od po 100ns. Rezultati ove studije ukazali su na neke od ključnih rezidua neophodnih za stabilizaciju kompleksa Sirt2/inhibitor. Takođe, opisane konformacije daju jasniji uvid u katalitički ciklus deacilovanja. Opisan je i značaj konformacije kofaktorske petlje na konformaciju vezivnog mesta inhibitora. Rezultati ove studije će omogućiti racionalniji pristup dizajnu selektivnijih i potentnijih inhibitora sirtuina2.

Exploring conformational changes of sirtuin 2- molecular dynamic approach

Nemanja B. Djokovic, Jonna K. Tyni*, Katarina Nikolic, Danica Agbaba,
Maija Lahtela-Kakkonen*

*Department of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Pharmacy, University of Belgrade,
Belgrade, Serbia*

**School of Pharmacy (Pharmaceutical Chemistry), University of Eastern Finland,
Kuopio, Finland*

Sirtuin 2 (Sirt2) has been implicated in pathogenesis of cancer, inflammation and neurodegeneration, which makes Sirt2 attractive target for development of novel therapeutics. A number of small molecule Sirt2 inhibitors have been reported, but most of them lack selectivity and/or high potency. Very recently published X-ray structures of selective ligand/Sirt2 complexes have revealed more details about mechanism of action of inhibitors, but some information still missing. Here, we will try to answer on questions regarding the conformational changes during enzyme catalysis, based on our recent molecular dynamic study of Sirt2. Total of seventeen 100 ns simulations have been performed on five different crystal structures. Results of this study have suggested one of key residues responsible for conformational stability of cofactor-binding loop and significant interaction with novel inhibitors. Further, “closing” of Sirt2 induced by presence of substrate has been described as major factor responsible for conformational changes in substrate-binding site. In conclusion, this study provides dynamic information on Sirt2 and may facilitate the rational design on novel, more potent and selective inhibitors.