

Srpsko hemijsko društvo



Serbian Chemical Society

**60. Savetovanje
Srpskog hemijskog društva**

**KRATKI IZVODI
RADOVA**

**60th Meeting of
the Serbian Chemical Society**

Book of Abstracts

**Niš 8. i 9. jun 2024. godine
Niš, Serbia, June 8-9, 2024**

CIP- Каталогизација у публикацији
Народна библиотека Србије, Београд

60. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA

Niš, 8. i 9. jun 2024.

KRATKI IZVODI RADOVA

60th MEETING OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY

Niš, Serbia, 8-9 June 2024

BOOK OF ABSTRACTS

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 Srpskog hemijskog društva

Glavni i odgovorni urednik / Editor

Niko Radulović

Uredivački odbor / Editorial Board

Dušan Sladić, Niko Radulović

Priprema za štampu i štampa/Prepress and printing

Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva Tehnološko-metalurškog

fakulteta, Beograd / Research and Development Centre of Printing Engineering, Belgrade

Tiraž/ Circulation

20 primeraka / 20 copies printing

ISBN 978-86-7132-086-3

Naučni odbor

Scientific Committee

Niko Radulović, predsednik/chair

Dušan Sladić

Radomir Saičić

Ivanka Popović

Gordana Stojanović

Sanja Grgurić Šipka

Snežana Tošić

Tatjana Andelković

Goran Roglić

Igor Pašti

Vidoslav Dekić

Vesna Mišković-Stanković

Maja Stanković

Milan Dekić

Marija Genčić

Marko Rodić

Aleksandar Oklješa

Boris Furtula

Dušica Rodić

Aleksandra Dapčević



Organizacioni odbor

Organising Committee

Marko Mladenović, predsednik/chair

Niko Radulović

Marija Genčić

Dragan Zlatković

Miljana Đorđević Zlatković

Milena Živković Stojić

Milan Nešić

Milica Nešić

Jelena Denić

Milan Dimitrijević

Dijana Jovanović

Danijela Nikolić

Luka Vasić



Savetovanje je podržalo / Supported by

Ministarstvo nauke, tehnološkog razvoja i inovacija Republike Srbije

Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia

Ova knjiga sadrži kratke izvode
dva plenarna predavanja (PP),
šest predavanja po pozivu (PPP),
jedno predavanja dobitnika Medalje SHD (MP),
deset usmenih saopštenja (US) i
osamdeset dva saopštenja (obima jedne stranice)
prihvaćenih za prezentovanje na
60. Savetovanju Srpskog hemijskog društva.

This book contains abstracts of
two plenary lectures (PP),
six invited lectures (PPP),
lecture of SCS Medal awardee (MP),
ten oral presentations (US), and
eighty-two abstracts
accepted for presentation at
the 60th Meeting of the Serbian Chemical Society.

*Informacije i stavovi izneti u ovoj publikaciji su provizorni. Srpsko hemijsko društvo, urednik i uređivački odbor nisu odgovorni za interpretacije, eventualne posledice i štamparske greške.
The information and the opinions given in this publication are provisional. Serbian Chemical Society, Editor or Editorial Board are not responsible for any interpretations, their consequences or typographical errors.*

SADRŽAJ / CONTENTS

Plenarna predavanja / Plenary lectures

| | | | |
|------|---------------------------|---|----|
| PP-1 | Svilen Simeonov | Transformations and applications of biomass-derived C5 and C6-furanic platform chemicals | 17 |
| PP-2 | Nikolay Georgiev Vassilev | Recent advances in stereodynamics and conformational analysis of new functional materials by dynamic NMR and theoretical calculations | 18 |

Predavanja po pozivu / Invited lectures

| | | | |
|-------|------------------------|---|----|
| PPP-1 | Dragan Zlatković | O konfiguraciji prirodnih 2,6-ciklokuparan-3-ola: konačno razrešenje sporne situacije | 20 |
| PPP-2 | Miha Bukleski | Hybrid organic-inorganic perovskites: synthesis and spectroscopic properties | 21 |
| PPP-3 | Tatjana Trtić-Petrović | Zelene ekstrakcione metode: progres i izazovi | 22 |
| PPP-4 | Mirjana Radanović | Koordinaciona hemija Šifovih baza - primena u solarnim tehnologijama | 23 |
| PPP-5 | Tatjana Andđelković | Ftalati: izvori, migracija, određivanje i štetno dejstvo | 24 |
| PPP-6 | Dušica Rodić | Višestruki pokazatelji učeničkih postignuća u hemiji | 25 |

Predavanje dobitnika medalje SHD za pregalaštvo i uspeh u nauci / Lecture by the winner of the SCS medal for achievement and success in science

| | | | |
|------|------------------|--|----|
| MP-1 | Danijel Milinčić | Primena UHPLC Q-ToF MS za analizu bioaktivnih jedinjenja u hrani | 27 |
|------|------------------|--|----|

Usmena saopštenja / Oral presentations

| | | | |
|------|---------------------|---|----|
| US-1 | Srđan Bjedov | „U labu” – naučno-popularni podkast | 29 |
| US-2 | Sladana Đorđević | Strukturna zavisnost energije tripletnih stanja u konjugovanim molekulima | 30 |
| US-3 | Dušan Malenov | Priroda jon- π interakcija (polu)sendvič-jedinjenja – XEDA studija | 31 |
| US-4 | Marko Rodić | Kristalna struktura novog hibrida ferocena i tiazolo[3,4- <i>a</i>]pirazin-5,8-diona | 32 |
| US-5 | Katarina Postolović | Simultano određivanje dopamina, serotonina, askorbinske kiseline i nitritnog jona primenom modifikovane GCE | 33 |
| US-6 | Biljana Arsić | Inhibicija aktivnosti butirilholinesteraze od strane abamektina i boskalida: kompjuterska i <i>in vitro</i> proučavanja | 34 |
| US-7 | Jelena Kesić | Uticaj estarskih grupa na biološku aktivnost analoga kleistanolata | 35 |
| US-8 | Samira Plojović | Antimikrobnna aktivnost salvipizona: <i>in silico</i> i <i>in vitro</i> ispitivanja | 36 |
| US-9 | Dorđe Janković | Novi steroidni karbamati kao potencijalni ligandi za estrogene receptore | 37 |

| | | | |
|-------|----------------|--|----|
| US-10 | Aleksa Alargić | Halogenovani tiazolni furo-dioksolani i <i>in silico</i> pretraga za njihovim potencijalnim metama | 38 |
|-------|----------------|--|----|

Saopštenja / Contributions

Analitička hemija / Analytical Chemistry

| | | | |
|------|---------------------|---|----|
| AH-1 | Katarina Milenković | Određivanje makro- i mikroelemenata u uzorcima <i>Rosa agrestis</i> Savi. primenom optimizovane i validirane ICP AES metode | 40 |
| AH-2 | Biljana Šmit | Lipofilnost i retenciono ponašanje derivata ariliden-2-tiohidantoina na F5 koloni primenom HPLC tehnike | 41 |
| AH-3 | Jelena Vesković | Procena pogodnosti podzemnih voda za piće i navodnjavanje u dolini reke Jadar | 42 |
| AH-4 | Tijana Radojičić | Efikasnost adsorpcije-desorpcije i ponovna upotreba modifikovanog letećeg pepela u uklanjanju azo-boja | 43 |
| AH-5 | Sara Pantović | Toksični elementi u uzorcima biljne vrste <i>Sympytum officinale</i> L. sa planine Golije, Novi Pazar, Srbija | 44 |
| AH-6 | David Pirić | Upoređivanje različitih protokola za ekstrakciju lipida iz uzorka humane plazme i seruma | 45 |
| AH-7 | Dušan Trajković | Procena ekološkog rizika deponovanja letećeg pepela | 46 |
| AH-8 | Olivera Marković | Ispitivanje uticaja koncentracije suspenzije na širinu pHmax–pHmin opsega tokom određivanja rastvorljivosti | 47 |
| AH-9 | Milena Stevanović | Bioaktivnost kompozitnih biokeramičkih prevlaka i otpuštanje gentamicina – <i>in vitro</i> ispitivanja | 48 |

60. Savetovanje SHD

| | | | |
|-------|-----------------|---|----|
| AH-10 | Milan Stanković | Sinteza elektrohemijiskog PPy-MWCNT-GCE MOP senzora za osetljivu detekciju ciprofloksacina | 49 |
| AH-11 | Jelena Božović | Određivanje mineralnog sastava tri lekovite gljive koje rastu na bukvi na teritoriji Srbije | 50 |

Biohemija / Biochemistry

| | | | |
|------|------------------------|---|----|
| BH-1 | Suzana Jovanović Šanta | Dizajn bočno usmerene mutageneze za dobijanje polimorfnih oblika LacI proteina | 52 |
| BH-2 | Jelena Aćimović | Soft i hard korona mikroplastike u interakciji sa alergenom β -laktoglobulinom kravljeg mleka | 53 |

Elektrohemija / Electrochemistry

| | | | |
|------|------------------|---|----|
| EH-1 | Tijana Vlašković | Elektrohemijska aktivnost perovskitskog oksida $\text{Ca}_{0.9}\text{Er}_{0.1}\text{MnO}_3$ | 55 |
| EH-2 | Milica Košević | Aktivnost elektrohemijski taloženih nanosfera Pd u reakcijama oksidacije metanola i etanola u alkalnim rastvorima | 56 |
| EH-3 | Jelena Bajat | Sinergetski efekat Co i RE-kompleksa u prevlakama Zn za zaštitu čelika od korozije | 57 |
| EH-4 | Marija Đošić | Polimer/hidroksiapatit kompozitne prevlake na površini implantata dobijene elektroforetskim taloženjem | 58 |

Fizička hemija / Physical Chemistry

| | | | |
|------|----------------|---|----|
| FH-1 | Jovana Acković | Sinteza i karakterizacija soli heteropolikiseline dopirane Zn^{2+} ionima | 60 |
| FH-2 | Andrija Vukov | Uticaj veštačkih zaslađivača natrijum-saharina i kalijum-acesulfama na hidrataciona svojstva, ukus i rastvorljivost kofeina | 61 |

Hemijsko inženjerstvo / Chemical Engineering

| | | | |
|------|-----------------------|---|----|
| HI-1 | Darko Jaćimovski | Ekstrakcija polifenola iz kore nara u sistemu sa pakovanim slojem i recirkulacijom tečne faze | 63 |
| HI-2 | Katarina Šućurović | Eksperimentalno ispitivanje pada pritiska u modifikovanom fontanskom sloju | 64 |

Hemija i tehnologija hrane / Chemistry and Technology of Food

| | | | |
|-------|---------------|---|----|
| HTH-1 | Biljana Arsić | UV-VIS metoda za kontrolu sadržaja prolina u uzorcima meda | 66 |
| HTH-2 | Vibor Roje | Multielementarna analiza flaširanih voda pomoću tehnike ICP-AES | 67 |
| HTH-3 | Mirjana Pešić | Proteinski profil liofilisanog praha kožnjeg mleka obogaćenog ekstraktom <i>Agrocybe aegerita</i> (V. Brig.) Singer | 68 |

Hemija i tehnologija materijala / Chemistry and Technology of Materials

| | | | |
|-------|------------------------|---|----|
| HTM-1 | Marija Lučić Škorić | Ekološki prihvatljivo rešenje za zagađenje vode: hidrogelovi hitozana | 70 |
| HTM-2 | Ksenija Milošević | Zeleni hidrogelovi na bazi polisaharida za remedijaciju otpadnih voda | 71 |
| HTM-3 | Ana Janković | Modeli otpuštanja leka iz hidrogela poli(vinil alkohol)/hitozan/gentamicin (PVA/CHI/Gent) | 72 |

Hemija životne sredine / Environmental Chemistry

| | | | |
|-------|---------------------|---|----|
| HŽS-1 | Marija Kovačević | Fotodegradacija ciprofloxacina sa Fe-modifikovanim TiO ₂ | 74 |
| HŽS-2 | Jelena Obradovic | Odnos između unutrašnjeg i spoljašnjeg aerozagadjenja u školi | 75 |

60. Savetovanje SHD

| | | | |
|-------|----------------------|--|----|
| HŽS-3 | Aleksandra Skrobonja | Per- i polifluoralkil supstance u Srbiji – prisustvo, sudbina i kruženje u vodenim sredinama | 76 |
| HŽS-4 | Aleksandra Adamović | Uklanjanje fenola iz vode primenom biouglja dobijenog iz različitih vrsta lignocelulozne biomase | 77 |
| HŽS-5 | Miloš Momčilović | Primena pikosekundnog i nanosekundnog impulsnog laserskog zračenja u predtretmanu TiO ₂ za primene u fotokatalizi | 78 |
| HŽS-6 | Ana Lazić | Distribucija metala u tragovima u zemljištu u blizini termoelektrana i procena statusa zagađenja | 79 |
| HŽS-7 | Marina Radenković | Adsorpcija mezotriona iz vodenih rastvora korišćenjem aktiviranog ugljeničnog materijala agroindustrijskog otpada suncokreta | 80 |
| HŽS-8 | Milan Stanković | Sadržaj toksičnih elemenata u zemljištu sa dečjih igrališta urbanog područja Beograda | 81 |
| HŽS-9 | Nenad Grba | Materijali na bazi geopolimera za adsorpciju fenola iz otpadnih voda | 82 |

Medicinska hemija / Medicinal Chemistry

| | | | |
|------|---------------|--|----|
| MH-1 | Budimir Ilić | Simulacije molekularne dinamike vezivanja 7,8-dihidrosiflavona za TrkB receptor: uvidi u agonistički mehanizam | 84 |
| MH-2 | Srđan Bjedov | Novi steroidni NRF2 aktivatori. Sinteza i biološka aktivnost | 85 |
| MH-3 | Marija Genčić | Tiazolo[3,4- <i>a</i>]pirazin-5,8-dioni sa ferocenskim i hinolinskim motivima kao obećavajući antimikrobni agensi | 86 |
| MH-4 | Milica Nemoda | Potencijal nanočestica zlata i srebra u inhibiciji oralnih patogena | 87 |

60. Savetovanje SHD

| | | | |
|------|----------------------|--|----|
| MH-5 | Aleksandra Bondžić | Uticaj uvođenja Zr jona na stabilnost, lipofilnost i mogućnosti prolaska krvno-moždane barijere polioksometalata | 88 |
| MH-6 | Sladana Stanisljević | Sinteza, <i>in vitro</i> i <i>in silico</i> ispitivanja novog analoga (-)-murikatacina | 89 |
| MH-7 | Bojan Levovnik | Sinteza i <i>in silico</i> analiza dva nova bromovana furodioksolna epimera | 90 |

Neorganska hemija / Inorganic Chemistry

| | | | |
|------|-------------------|--|----|
| NH-1 | Bojana Pantović | Sinteza i strukturna karakterizacija kompleksa galijuma(III) sa 1,3-propandiamin- <i>N,N</i> -diacetatom | 92 |
| NH-2 | Tina Andrejević | Katalitička aktivnost kompleksa bakra(II) sa dimetil-6-(pirazin-2-il)piridin-3,4-dikarboksilatom u oksidaciji 3,5-di- <i>terc</i> -butilkatehola | 93 |
| NH-3 | Nevena Stevanović | Ispitivanje BSA interakcija kompleksa zlata(III) sa azolima | 94 |
| NH-4 | Milica Savić | Evaluacija biološke aktivnosti hidrazonskih kompleksa cinka | 95 |
| NH-5 | Božidar Čobeljić | Sinteza i stabilnost hidrazonskih kompleksa Zn(II) | 96 |
| NH-6 | Dragan Ninković | DFT ispitivanje dimerizacije Ni(II) kompleksa | 97 |

Nastava i istorija hemije / Education in and History of Chemistry

| | | | |
|-------|---------------|--|----|
| NIH-1 | Sladana Savić | Kako učenici sedmog razreda u Srbiji prepoznaju i analiziraju probleme u životnoj sredini? | 99 |
|-------|---------------|--|----|

60. Savetovanje SHD

| | | | |
|-------|-----------------------------------|--|-----|
| NIH-2 | Ivana Veljković | Poređenje Fenske-Holovog metoda i metoda Teorije funkcionala gustine za razjašnjavanje koncepta molekulskih orbitala u kompleksima prelaznih metala | 100 |
| NIH-3 | Vesna Milanović Maštrapović | Učeničko tumačenje reprezentacija iz udžbenika hemije pre i tokom pandemije COVID-19 | 101 |

Organska hemija / Organic Chemistry

| | | | |
|-------|------------------------|---|-----|
| OH-1 | Ivana Kuzminac | Antitumorska aktivnost novih proizvoda dearomatizacije estradiola | 103 |
| OH-2 | Jovica Branković | <i>In silico</i> dizajn i ispitivanje odabranih eutektičkih rastvarača na bazi holin-hlorida | 104 |
| OH-3 | Sanja Đokić | Prva totalna sinteza (+)- i (-)-asperilaktona B | 105 |
| OH-4 | Bojan Ilić | Hemijski sastav odbrambenog sekreta stonoge <i>Megaphyllum erythronotum</i> (Latzel, 1884) (Diplopoda, Julida) | 106 |
| OH-5 | Suzana Janićević | Dizajn, sinteza i spektralna karakterizacija novih kumarin-halkonskih derivata | 107 |
| OH-6 | Tamara Todorović | Sinteza benzimidazola primenom DES-a | 108 |
| OH-7 | Aleksandar Janković | Intramolekulska kooperativno katalizovana Cudi-Trostova reakcija kao nova metoda za sintezu spirobicikličnih jedinjenja | 109 |
| OH-8 | Marko Mladenović | Novi estri iz etarskog ulja <i>Pelargonium</i> sp. (Geraniaceae) | 110 |
| OH-9 | Ivan Borković | Nova reakcija tioestara sa stabilizovanim karbenima: dobijanje α -tioketona | 111 |
| OH-10 | Amina Gusinac | Konformaciona analiza na osnovu analize konstanti sprezanja u ^1H NMR spektru salvipizona | 112 |

60. Savetovanje SHD

| | | | |
|-------|------------------|---|-----|
| OH-11 | Ana Bijelić | Potencijalni nosioci antioksidativne aktivnosti gljive <i>Hericium erinaceus</i> : uvid iz (q)NMR analize | 113 |
| OH-12 | Bojan Bondžić | Fotokatalitičko fluorovanje neaktiviranih C-H veza u mikrofluidnim reaktorima | 114 |
| OH-13 | Bojan Vulović | Hidroalkilovanje vinil-sulfona alkoholima pomoću vidljive svetlosti bez upotrebe fotokatalizatora | 115 |
| OH-14 | Vojislava Poštić | Proizvodnja i karakterizacija nanočestica poli(etilen-tereftalata): sinteza, određivanje veličine i kontrola sastava | 116 |
| OH-15 | Dijana Jovanović | Potpuna spektralna karakterizacija preizokalamendiola izolovanog iz etarskog ulja biljne vrste <i>Acorus calamus L.</i> | 117 |

Teorijska hemija / Theoretical Chemistry

| | | | |
|------|--------------------|---|-----|
| TH-1 | Ivana Stojiljković | Tautomerne preferencije derivata 5-benzilidenbarbiturne kiseline: eksperimentalno i kvantnohemijsko proučavanje | 119 |
| TH-2 | Aleksandar Oklješa | Mehanizmi supstitucije halogena tetrazolatnim jonom | 120 |

Tekstilno inženjerstvo / Textile Engineering

| | | | |
|------|-----------------|---|-----|
| TI-1 | Miroslav Kalanj | Uspostavljanje nove metode za merenje jačine i izduženja spiralno obmotanih elastomernih predra | 122 |
|------|-----------------|---|-----|

Zelena hemija / Green Chemistry

| | | | |
|------|-----------------------|--|-----|
| ZH-1 | Aleksandra Bogdanović | Optimalno dobijanje bioaktivnih ekstrakata iz otpadnog materijala vrsta roda <i>Mentha</i> natkritičnom ekstrakcijom | 124 |
| ZH-2 | Marijana Ponjavić | Zeleni pristup za diverzifikaciju bakterijskih prirodnih proizvoda | 125 |

60. Savetovanje SHD

| | | | |
|-------|-------------------------|--|-----|
| ZH-3 | Natalija Nedić | <i>Ambrosia artemisiifolia</i> – biosorbent za sintetičke organske boje | 126 |
| ZH-4 | Olga Pantić | Optimizacija procesa umrežavanja ekološki prihvatljive nezasićene poliestarske smole | 127 |
| ZH-5 | Nikolett Cakó Bagány | Antimikrobnna aktivnost novosintetisanih jonskih tečnosti sa karboksilatnim anjonima | 128 |
| ZH-6 | Andjela Simović | Inhibicija korozije ugljeničnog čelika u 1 M HCl pomoću ekološki prihvatljivog inhibitora (Pančićeva omorika): kombinovanje eksperimentalnih i teorijskih metoda | 129 |
| ZH-7 | Sanja Belić | Ispitivanje vodenih rastvora novosintetisane jonske tečnosti 1-butil-3-metilimidazolijum-2-hidroksi-2-fenilacetata | 130 |
| ZH-8 | Andrija Kokanović | PdZn-ZnO bimetalni katalizator sintetisan u gasovitoj fazi u jednom koraku za redukciju nitroarenskih zagađivača | 131 |
| ZH-9 | Jelena Milić | Zelena hemija: trendovi u Srbiji (2014-2024) | 132 |
| ZH-10 | Dajana Lazarević | Zelena ekstrakcija: termoreverzibilni vodeni dvofazni sistemi za direktno izolovanje partenolida iz biomase | 133 |
| ZH-11 | Andjela Stanislavljević | Jednostavna sinteza različito supstituisanih 2-piridona u čvrstoj fazi | 134 |
| ZH-12 | Jelena Jovanović | Zelena ekstrakcija bioaktivnih pigmenata iz spiruline primenom prirodnih eutektičkih smeša | 135 |

KRATKI IZVODI RADOVA

Short abstracts



Inhibicija aktivnosti butirilholinesteraze od strane abamektina i boskalida: kompjuterska i *in vitro* proučavanja

Biljana B. Arsić¹, Milka Vrecl², Tomaž Trobec², Kristina Sepčić³, Robert Frangež², Sanja M. Glišić⁴, Jelena S. Milićević⁴

¹ Univerzitet u Nišu, Prirodno-matematički fakultet u Nišu, Departman za hemiju, Niš, Republika Srbija

² Univerzitet u Ljubljani, Veterinarski fakultet, Institut za preklinička ispitivanja, Ljubljana, Slovenija

³ Univerzitet u Ljubljani, Biotehnički fakultet, Departman za biologiju, Ljubljana, Slovenija

⁴ Univerzitet u Beogradu, Institut za nuklearne nauke „Vinča“, Laboratorija za bioinformatiku i računarsku hemiju, Beograd, Republika Srbija

Rastući trend za poljoprivrednim proizvodima doveo je do pogrešne upotrebe pesticida. Butirilholinesteraza (BChE) sprečava određene pesticide da nepovratno inhibiraju acetilholinesterazu (AChE), drugi enzim ključan za neurotransmisiju. Za naša istraživanja smo izabrali često korišćene pesticide abamektin i boskalid. Naša *in silico* i *in vitro* istraživanja su pokazala da BChE iz *Homo sapiens*-a nije meta za abamektine B1A i B1B. Boskalid je pokazao gori Glide score (-6.88 kcal/mol) nego potvrđeni inhibitor BChE (2-((1-(benzensulfonil)-1*H*-indol-4-il)oksi)etyl)(benzil)amin sa $IC_{50}=0.473\text{ }\mu\text{M}$ (Glide score = -8.64 kcal/mol), tako da nije iznenadujuće da je njegov IC_{50} značajno viši. Ova studija naglašava zaštitnu ulogu BChE protiv određenih pesticida.

Inhibition of butyrylcholinesterase activity by abamectin and boscalid: computational and *in vitro* studies

Biljana B. Arsić¹, Milka Vrecl², Tomaž Trobec², Kristina Sepčić³, Robert Frangež², Sanja M. Glišić⁴, Jelena S. Milićević⁴

¹ University of Niš, Faculty of Sciences and Mathematics, University of Niš, Niš, Republic of Serbia

² University of Ljubljana, Veterinary Faculty, Institute for Preclinical Sciences, Ljubljana, Slovenia

³ University of Ljubljana, Biotechnical Faculty, Department of Biology, Ljubljana, Slovenia

⁴ University of Belgrade, Institute of Nuclear Sciences, Department for Bioinformatics and Computational Chemistry, Belgrade, Republic of Serbia

The growing demand for agricultural products has led to the misuse of pesticides. Butyrylcholinesterase (BChE) prevents some pesticides from irreversibly inhibiting acetylcholinesterase (AChE), another enzyme crucial for neurotransmission. For our studies, we choose commonly used pesticides abamectin and boscalid. The *Homo sapiens* BChE was shown not to be a target for abamectins B1A and B1B either *in silico* or *in vitro*. Boscalid showed a worse Glide score (-6.88 kcal/mol) than the approved BChE inhibitor (2-((1-(benzenesulfonyl)-1*H*-indol-4-yl)oxy)ethyl)(benzyl)amine with an IC_{50} value of 0.473 μM (Glide score=-8.64 kcal/mol), so it is not surprising that its IC_{50} is significantly higher. This study highlights the protective role of BChE against certain pesticides.