

Naziv projekta: **Fluorimetrijske i *in silico* studije interakcije albumina sa sintetskim kumarinima**

**Trajanje projekta:** dvije godine

**Finansijer projekta:** Ministarstva za nauku, visoko obrazovanje i mlade Kantona Sarajevo  
(odobrena sredstva: 8.500,00 KM)

**Opis projekta:** Kumarin (2*H*-1-benzopiran-2-on) i njegovi derivati su heterociklički spojevi s benzopironskom jezgrom, a sastoje se od benzenskog prstena kondenziranog s pironskim prstenom, dok se u prirodi nalaze i u kombinaciji s glikozidima. Zahvaljujući svojoj raznolikosti i različitim svojstvima, kumarini su predmet brojnih istraživanja. Posebno su značajni zbog izrazite biološke aktivnosti kao što je antioksidacijska, antibakterijska i antikancerogena aktivnost, te brojne druge. Serum albumin je najzastupljeniji protein u krvnoj plazmi svih sisara. Posjeduje izuzetan kapacitet vezivanja velikog broja različitih liganada, kako endogenih, tako i egzogenih molekula kakvi su lijekovi. Mogućnost vezivanja različitih molekula je ono što određuje široku primjenu serum albumina u biohemijske, kliničke, te farmaceutske svrhe. Ispitivanje sposobnosti vezivanja odabranih sintetskih kumarina za serum albumin, uz predstavljanje značajnih termodinamičkih parametara kao što su konstante vezivanja, broj vezanih liganada, Gibbsove energije, entalpije i entropije predstavljaju primatni dio ovog istraživanja. Sinhronim i 3D spektrima će biti interpretirane promjene u bočnoj strukturi albumina. Drugi dio istraživanja obuhvata FRET analizu udaljenosti proteina i liganda, kao i nanoDSF metodu određivanja temperature odvijanja proteina. U finalnom dijelu, biće sprovedena *in silico* analiza interakcije. Veći dio projekta će biti realizovan na Prirodno-matematičkom fakultetu Univerziteta u Sarajevu, dok će nanoDSF metoda biti urađena na Češkom institutu za naprednu tehnologiju i istraživanja (CATRIN) Palacký Univerziteta (Češka Republika).

**Projektni tim:**

Dr. sc. Anela Topčagić, docent, voditelj projekta

Dr. sc. Amira Čopra-Janićijević, redovni profesor

Dr. sc. Lejla Klepo, vanredni profesor

Dr. sc. Jelena Ostojić, docent

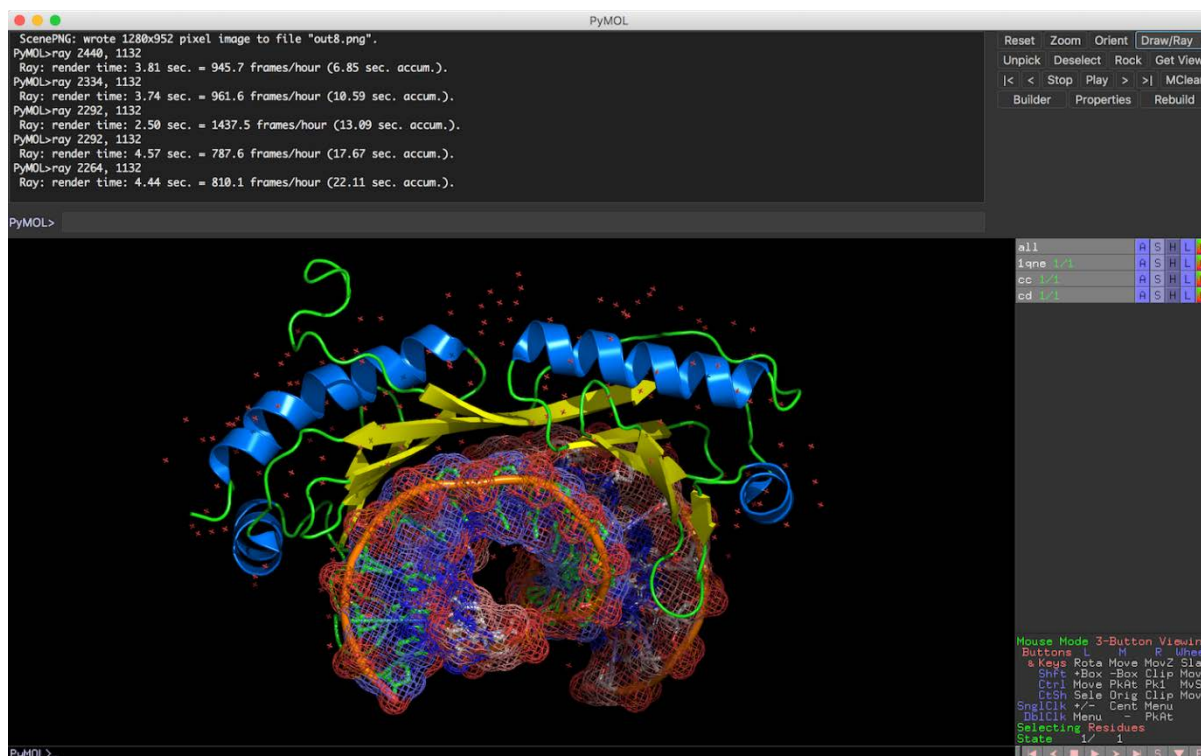
Dr. sc. Muamer Dizdar, docent

Dr. sc. Sanja Ćavar Zeljković, viši naučni saradnik

**Rezultati projekta:**

U okviru projekta nabavljen je dio hemikalija potrebnih za izvođenje eksperimentalnog dijela projekta, kao i laboratorijska oprema i pribor. Nabavljen je i software PyMol+AxPyMol ([PyMOL | pymol.org](http://PyMOL.pymol.org)) koji se koristi za *in silico* analizu, molekularno modeliranje i vizualizaciju interakcija makromolekula i liganada. Program je namjenjena za profesionalni nivo rada uz

članarinu za naredne tri godine. Za navedeni software nabavljena je i odgovarajuća prateća kompjuterska oprema.



**PyMol Software:** Vizuelizacija interakcija

Rezultati dobijeni u sprovedenom dijelu eksperimentalnih istraživanja u okviru projekta prezenitrani su na međunarodnog Kongresu - 4th Internacional Congress of Chemists and Chemical Engineers of Bosnia and Herzegovina održanog u Sarajevu (30. juna-02. jula 2022. godine). Radovi Kongresa su objavljeni u specijalnom izdanju Glasnika hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine (Special Issue of Bulletin of the Chemists and Technologist of Bosnia and Herzegovina) koji je indeksiran u Web of Science - Emerging Sources Citation Index ([Special Issue 2022 \(unsa.ba\)](https://www.unsa.ba)).

1. Ligata, E., Fazlić, A., **Dizdar, M., Čavar Zeljković, S., Topčagić, A. (2022)** Binding constants setermination of the interaction of albumin with 6-substitued-4-methylcoumarins, 4<sup>th</sup> International Congress of Chemists and Chemical Engineers of Bosnia and Herzegovina, 30 June-02 July 2022, Sarajevo, Bosnia and Herzegovina, Bulletin of the Chemists and Technologists of Bosnia and Herzegovina, Special Issue 2022, Book of Abstracts, 51.
2. Fazlić, A., Ligata, E., **Dizdar, M., Čavar Zeljković, S., Topčagić, A. (2022)** Fluorimetric interaction studies of albumin with 7-substitued-4-methylcoumarins, 4<sup>th</sup> International Congress of Chemists and Chemical Engineers of Bosnia and Herzegovina, 30 June-02 July 2022, Sarajevo, Bosnia and Herzegovina, Bulletin of the Chemists and Technologists of Bosnia and Herzegovina, Special Issue 2022, Book of Abstracts, 52.

Četiri mlada istraživača-studenta su odbranili završne radove I i II ciklusa studija pod mentorstvom voditelja projekta, a koji su rađeni u sklopu istraživanja na projektu, pod naslovima:

- „Određivanje konstante vezivanja i *in silico* analiza interakcije albumina sa benzoatima 4-metilkumarina“ – završni rad II ciklusa, Amila Dedić
- „Određivanje konstante vezivanja i *in silico* analiza interakcije albumina sa odabranim derivatima 4-metilkumarina“ - završni rad II ciklusa, Anisa Lelo
- „Fluorimetrijske studije interakcije albumina sa 6-supstituiranim 4-metilkumarinima“ - završni rad I ciklusa, Emina Ligata
- „Fluorimetrijske studije interakcije albumina sa 7-supstituiranim 4-metilkumarinima završni rad II ciklusa“ – završni rad I ciklusa, Aiša Fazlić

Za akademsku 2022/2023. godinu planirano je pet završnih radova I i II ciklusa koji će biti realizovani u sklopu projekta. Nazivi predloženih tema završnih radova su:

- Ispitivanja interakcija albumina humanog seruma sa derivatima boronske kiseline
- Određivanje konstante vezivanja i studija interakcije albumina humanog seruma sa 7-supstituiranim 4-metilkumarinima
- Određivanje konstante vezivanja i studija interakcije albumina humanog seruma sa 6-supstituiranim 4-metilkumarinima
- Određivanje konstatne vezivanja interakcije albumina humanog seruma sa odabranim derivatima 4-metilkumarina
- Fluorimetrijske studije interakcije albumina sa 3-cijano supstituiranim 4-metilkumarinima