

УНИВЕРЗИТЕТ У БАЊОЈ ЛУЦИ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

III СИМПОЗИЈУМ БИОЛОГА И ЕКОЛОГА
РЕПУБЛИКЕ СРПСКЕ
(СБЕРС 2015)

ЗБОРНИК САЖЕТАКА



Бања Лука, 12. – 14. новембар, 2015. године

**III СИМПОЗИЈУМ БИОЛОГА И ЕКОЛОГА РЕПУБЛИКЕ СРПСКЕ
(СБЕРС 2015)**

Издавач

Природно-математички факултет, Бања Лука

Овлаштено лице за заступање и представљање издавача

Горан Трбић

Главни и одговорни уредник

Биљана Кукавица Јовановић

Коректор и електронска припрема

Јасна Фришчић

Фотографија на насловној страни

Вријека, Дабарско поље (Драгојла Голуб)

Тираж

250 примјерака

Природно-математички факултет Универзитета у Бањој Луци

Младена Стојановића 2

78000 Бања Лука

Република Српска, БиХ

Tel./faks: 00 387 (0)51 319 142

Веб сајт: <http://www.pmfbl.org/simpozijum/>

E mail: sbers2015@pmfbl.org

Организатор:

Природно-математички факултет Универзитета у Бањој Луци

Покровитељи:

Министарство науке и технологије Републике Српске

Фонд за заштиту животне средине и енергетску ефикасност Републике Српске

SINEKS лабораторија

Организациони одбор	Научни одбор
<p>Предсједник: др Драгојла Голуб, ПМФ, Бања Лука</p> <p>Чланови:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Др Стојко Видовић, ПМФ, Бања Лука • Др Радослав Декић, ПМФ, Бања Лука • Др Синиша Шкондрић, ПМФ, Бања Лука • Др Биљана Лубарда, ПМФ, Бања Лука • Др Свјетлана Лолић, ПМФ, Бања Лука • Др Тања Максимовић, ПМФ, Бања Лука • Др Нина Јањић, ПМФ, Бања Лука • Драго Лугић, инспектор-просвјетни савјетник за биологију, <p>Реп. педагошки завод, Бања Лука</p> <ul style="list-style-type: none"> • Мр Дино Хасанагић, ПМФ, Бања Лука • <i>Мсц Драгана Шњегота, ПМФ, Бања Лука</i> • Мсц Бранка Билбија, ПМФ, Бања Лука • Мр Дејан Дмитровић, ПМФ, Бања Лука • Мсц Милица Лукач, ПМФ, Бања Лука • Мсц Маја Петковић, ПМФ, Бања Лука • Мр Маја Манојловић, ПМФ, Бања Лука • Мр Јасна Фришчић, ПМФ, Бања Лука • Мр Горан Шукало, ПМФ, Бања Лука • Свјетлана Цвијић, ПМФ, Бања Лука <p>Секретаријат:</p> <ul style="list-style-type: none"> • др Смиљана Параш, секретар, ПМФ, Бања Лука • Мр Маја Манојловић, благајник, ПМФ, Бања Лука • Сања Карајлић, технички секретар, ПМФ, Бања Лука • Мсц Милица Лукач, ПМФ, Бања Лука • Мсц Билбија Бранка, ПМФ, Бања Лука • Мсц Драгана Шњегота, ПМФ, Бања Лука • Мсц Маја Петковић, ПМФ, Бања Лука • Мсц Мирела Бороја, ПМФ, Бања Лука • Мр Радојка Пајчин, ПМФ, Бања Лука • Драгана Декић, ПМФ, Бања Лука • Мсц Наташа Војиновић, ПМФ, Бања Лука • Жељка Остојић, ПМФ, Бања Лука 	<p>Предсједник научног одбора: др Живојин Ерић, ПМФ, Бања Лука, БиХ</p> <p>Чланови:</p> <p>Академик САНУ, др Владимир Стевановић, Биолошки факултет, Београд, Србија</p> <p>Др Љиљана Топалић-Тривуновић, ПМФ, Бања Лука, БиХ</p> <p>Др Нада Шуматић, Шумарски факултет, Бања Лука, БиХ</p> <p>Др Дмитар Лакушић, Биолошки факултет, Београд, Србија</p> <p>Др Јелена Алексић, ИМГГИ, Београд, Србија</p> <p>Др Горан Аначков, ПМФ, Нови Сад, Србија</p> <p>Др Боштјан Сурина, Универза на Приморском, Копер, Словенија</p> <p>Др Антун Алегро, ПМФ, Загреб, Хрватска</p> <p>Др Гордана Томовић, Биолошки факултет, Београд, Србија</p> <p>Др Пал Божа, ПМФ, Нови Сад, Србија</p> <p>Др Бојан Златковић, ПМФ, Ниш, Србија</p> <p>Др Данијела Стешевић, ПМФ, Подгорица, Црна Гора</p> <p>Др Милан Боришев, ПМФ, Нови Сад, Србија</p> <p>Др Александар Иванц, ПМФ, Бања Лука, БиХ</p> <p>Др Љиљана Томовић, Биолошки факултет, Београд, Србија</p> <p>Др Вера Никиолић, Биолошки факултет, Београд, Србија</p> <p>Др Боро Павловић, ПМФ, Бања Лука, БиХ</p> <p>Др Јасминка Хаџихалиловић, ПМФ, Тузла, БиХ</p> <p>Др Митар Новаковић, Педагошки факултет, Бијељина, БиХ</p> <p>Др Михајла Ђан, ПМФ, Нови Сад, Србија</p> <p>Др Весна Миланков, ПМФ, Нови Сад, Србија</p> <p>Др Рифет Терзић, ПМФ, Тузла, БиХ</p> <p>Др Касим Бајровић, ИНГЕБ, Сарајево, БиХ</p> <p>Др Соња Вельовић, ИМСИ, Београд, Србија</p> <p>Др Сабине Лутхје, Универзитет у Хамбургу, Њемачка</p> <p>Др Данијела Којић, ПМФ, Нови Сад, Србија</p> <p>Др Биљана Кукавица, ПМФ, Бања Лука, БиХ</p> <p>Др Љиљана Амишић, Медицински факултет, Бања Лука, БиХ</p> <p>Др Милан Матавуљ, ПМФ, Нови Сад, Србија</p> <p>Др Милица Матавуљ, ПМФ, Нови Сад, Србија</p> <p>Др Нина Јањић, ПМФ, Бања Лука, БиХ</p> <p>Др Томка Миљановић, ПМФ, Нови Сад, Србија</p> <p>Др Ивица Радовић, Факултет за безбедност, Београд, Србија</p> <p>Др Сенка Барудановић, ПМФ, Сарајево, БиХ</p> <p>Др Биљана Пањковић, Покрајински завод за заштиту природе Нови Сад, Србија</p> <p>Др Марјан Никетић, Природњачки музеј, Београд, Србија</p> <p>Др Михајло Марковић, Пољопривредни факултет, Бања Лука, БиХ</p> <p>Др Невенка Павловић, ПМФ, Бања Лука, БиХ</p> <p>Др Владимир Пешић, ПМФ, Подгорица, Црна Гора</p>

CIP - Каталогизација у публикацији
Народна и универзитетска библиотека
Републике Српске, Бања Лука

57(048.3)
502/504(048.3)

СИМПОЗИЈУМ биолога и еколога Републике Српске (3 ; 2015 ;
Бања Лука)

Зборник сажетака / III симпозијум биолога и еколога
Републике Српске, Бања Лука, 12-14. новембар 2015. године ;
[главни и одговорни уредник Биљана Куковица Јовановић]. - Бања
Лука : Универзитет у Бањој Луци, Природно-математички
факултет, 2015 (Бања Лука : Дневне независне новине). - 210 стр. ;
30 cm

Текст на срп. и енгл. језику. - Ћир. и лат. - Тираж 250.

ISBN 978-99955-21-43-1

COBISS.RS-ID 5429784

NEWLY DISCOVERED CHROMAN-2,4-DIONES NEUTRALIZE DNA ALKYLATION DAMAGE IN VIVO ON TOPIIA LEVEL: A STORY BEHIND THE MOLECULAR MODELLING APPROACH

Nevena Stanković^a, Milan Mladenović^a, Sanja Matić^b, Snežana Stanić^b, Mirjana Mihailović^c,
Vladimir Mihailović^d, Jelena Katanić^d, Tatjana Boroja^d, Nenad Vuković^e

^aKragujevac Center for Computational Biochemistry, Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Kragujevac, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia

^bDepartment of Biology and Ecology, Faculty of Science, University of Kragujevac, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia

^cDepartment of Molecular Biology, Institute for Biological Research, University of Belgrade, Bulevar Despota Stefana 142, 11000 Belgrade, Serbia

^dBioactive Natural Products Investigation, Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Kragujevac, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia

^eDepartment of Chemistry, Faculty of Science, University of Kragujevac, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia

Abstract

Eight chroman-2,4-diones, namely **2a-h**, were evaluated as *in vivo* genotoxic agents in Wistar rats livers and kidneys using the alkaline comet assay. Compounds **2a**, (*E*)-3-(1-(2-aminoethylamino) ethylidene) chroman-2,4-dione, **2b**, (*E*)-3-(1-(2-hydroxyethylamino) ethylidene) chroman-2,4-dione, and **2f**, (3*E*,3'*E*) - 3,3'-(1,1'-(ethane-1,2-diylbis (azanediyl)) bis (ethan-1-yl-1-ylidene)) dichroman-2,4-dione showed no genotoxic potential and were tested as antigenotoxic agents by application prior to ethyl methanesulfonate (EMS), a proven mutagen. As antigenotoxics, compounds significantly diminished EMS-induced DNA damage in both organs. The reduction of liver DNA damage amounted 86.93% (**2b**), 77.23% (**2f**), and 64.52% (**2a**), respectively, while the reduction in kidney DNA damage was 89.52 (**2b**), 82.50% (**2f**) and 68.14% (**2a**). Since EMS produce harmful *O*⁶-ethylguanine lesion which is incorporated in aberrant genotoxic G=T and T=G pairing after rat Topoisomerase II α (rTopII α) catalyzed ATP-dependent DNA strand breaks, the mechanism of **2a**, **2b**, and **2f** antigenotoxic activity was investigated on enzyme level using molecular docking and molecular dynamics simulations. According to molecular docking studies, those compounds occupy the ATPase region proximal to rGlu86, catalytic amino acid involved in the hydrolysis of γ -phosphate group of ATP *via* water bridges. Molecular dynamics simulations showed that **2a**, **2b**, and **2f** are a barrier for the formation of ATP-H₂O-rGlu86 bridge. Since compounds inhibit the hydrolysis of ATP, they prohibit the energy for the DNA double strand ligation, and therefore neutralize any possible damage that can arise after the formation of *O*⁶-ethylguanine harmful lesion. Consequently, compounds **2a**, **2b**, and **2f** prevent EMS mutagenic and carcinogenic effects, and can be applied in the cancer treatment to control the rate of anticancer alkylation drugs.

Key words: chroman-2,4-diones, Topoisomerase II α , molecular docking, molecular dynamics