

## АНАЛИЗА ДЕРИВАТА ТЕТРАИДРОКАНАБИНОЛА ПРИМЕНОМ МЕТОДЕ МОЛЕКУЛСКЕ СЛИЧНОСТИ

**Аутор:** Ђорђе Васић

**e-mail:** [djordje.vasilic998@gmail.com](mailto:djordje.vasilic998@gmail.com)

**Ментор:** проф. др Славица Ерић

Катедра за фармацеутску хемију, Фармацеутски факултет Универзитета у Београду

**Увод:** Мултипла склероза је неуродегенеративна болест различитих етиологија, и тренутно доступни лекови само делимично решавају проблеме везане за симптоме као и спречавање даљег прогреса МС. Екстракт *Cannabis sativa* (CS) је показао дејство на МС не само у смислу олакшавања симптома, спречавања прогреса развоја болести већ и у побољшању клиничке слике, што може бити повезано са обнављањем мијелинског омотача.

**Циљ рада:** Испитивање молекулских сличности деривата ТХЦ-а изолованих из CS у поређењу са агонистом (анадамид), парцијалним агонистом (THC) и антагонистом (THCV) канабиноидних рецептора, у циљу разјашњавања њихових механизма дејства и потенцијала у лечењу мултипле склерозе.

**Материјал и методе:** У раду је коришћен сет компонената према ElSohly M.A. Компоненте су цртане у ChemDraw Ultra 8.0, оптимизоване помоћу Chem3D Pro 8.0, а PCA анализа је урађена применом програма Pentacle.

**Резултати:** Показано је да се конституенти групишу у неколико главних група, при чему анадамид не припада ни једној групи, што индикује његову активност супстрата пре него активатора канабиноидних рецептора за регенерацију мијелина.

**Закључак:** Распон дејства од парцијалног агонисте ка антагонисти указује на регулацију канабиноидних рецептора у зависности од стања организма, обезбеђења функције канабиноидних рецептора као и многих других фактора који учествују у каскадном систему обнављања мијелинског омотача. Разматрана је и улога естера и њихових остатака у укупном дејству конституената. Потребне су додатне студије других конституената CS у циљу сагледавања укупног потенцијала и дејства ове биљке у третману мултипле склерозе.

**Кључне речи:** деривати тетраидроканабинола; метода молекулске сличности; мултипла склероза

## ANALYSIS OF TETRAHYDROCANNABINOL DERIVATIVES BY MOLECULAR SIMILARITY METHOD

**Author:** Đorđe Vasić

**e-mail:** [djordje.vasilic998@gmail.com](mailto:djordje.vasilic998@gmail.com)

**Mentor:** Full Prof. Slavica Erić

Department of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Pharmacy University of Belgrade

**Introduction:** Multiple sclerosis (MS) is neurodegenerative disease of various etiologies, and currently available drugs only partially solve the problems connected with symptoms and blocking further progress of MS. Extract of Cannabis Sativa (CS) showed activity on MS not only for relieving symptoms, blocking progress of disease, but also improvement of clinical features, which could be connected regeneration of myelin sheath.

**The Aim:** Investigation of molecular similarities of CS-derived THC derivatives compared to anadamide agonist, partial agonist (THC) and cannabinoid receptor antagonist (THCV), in order to elucidate their mechanisms of action and potential in the treatment of multiple sclerosis.

**Material and Methods:** A set of components according to ElSohly MA was used in the paper. The components were drawn in ChemDraw Ultra 8.0, optimized using Chem3D Pro 8.0, and PCA analysis was performed using the Pentacle program.

**Results:** It was shown that constituents are grouped in 5 main groups, whilst anadamide is considered as outlier, which indicates his activity as substrate rather than agonist of cannabinoid receptors for regeneration of myelin.

**Conclusion:** Scale of activities from partial agonism to antagonism indicate regulation of cannabinoid system depending on state of organism, function of cannabinoid receptors as well as many other factors in cascade system of regeneration of myelin shield. The role of esters and its remains in overall action of constituents is also considered. Further studies of other constituents of CS are needed for better understanding of potential activity of this plant in the treatment of MS.

**Keywords:** tetrahydrocannabinol derivatives; molecular similarity method; multiple sclerosis