

## РАЧУНАРСКИ СКРИНИНГ КОНСТИТУЕНАТА ЕТАРСКОГ УЉА *Satureja Montana* НА БИОЛОШКЕ ТАРГЕТЕ

**Аутори:** [Вук Обренић](#), [Ђорђе Василић](#)

**e-mail:** [vukobrenic9537@gmail.com](mailto:vukobrenic9537@gmail.com), [djordje.vasilic998@gmail.com](mailto:djordje.vasilic998@gmail.com)

**Ментор:** проф. др Славица Ерић

Катедра за фармацеутску хемију, Фармацеутски факултет Универзитета у Београду

**Увод:** *Satureja Montana* (СМ) је вишегодишња биљка из породице *Lamiaceae*, пореклом из топло-умерених региона јужне Европе. Фармаколошка дејства СМ укључују антимикуробни, антителметични, антивирусни, имуностимулаторни, антиканцерски, ноницицептивни, антидиуретички, као и многе друге ефекте. Комбиновано антивирусно и антимикуробно дејство од посебног је значаја за третирање вируса који су удружени са бактеријама. Конституенти СМ делују и на ретро вирусе, тако да су од значаја и механизми који спречавају ширење, развој и последице дејства ретро вируса. У овом раду испитивани су конституенти есенцијалног уља биљке *Satureja Montana* (СМ) у потенцијалном деловању на ретро вирусе, као што су *SARS CoV2* и *HIV*.

**Циљ рада:** Испитивање конституената есенцијалног уља СМ у циљу разјашњавања њихових општих и специфичних ефеката који могу бити значајни у третману COVID 19.

**Материјал и методе:** Хемијске структуре конституената (34) есенцијалног уља су припремљене и импортоване у програм *SwissTargetPrediction*.

**Резултати:** Резултати указују на то да конституенти, са одређеном предвиђеном вероватноћом, могу да ступају у интеракцију са аденозинским рецептором типа 1, УДП-глицуронозилтрансферазом, рецептор-зависним транспортним каналима, рецептор активираним пролифератором пероксисома алфа, карбоанхидразом, канабиноидним рецептором типа 2, 11б-хидроксистероидном дехидрогеназом типа 1, ацетилхолинестеразом, циклооксигеназом типа 1, андрогеним рецептором, цинковим прст протеином *GLI 2*, као и неким другим таргетима.

**Закључак:** Објашњена је потенцијална веза интеракција конституената са одабраним таргетима и фармаколошко дејства СМ на вирусе, на директан или индиректан начин. С обзиром да су у овом раду испитивани само конституенти есенцијалног уља СМ, потребно је извршити додатне студије конституената укупног екстракта СМ, у различитим растварачима, ради сагледавања укупног потенцијала ове биљке у терапији виремија.

**Кључне речи:** етарско уље; *Satureja Montana*; *SwissTargetPrediction*; *SARS CoV2*

## COMPUTER SCREENING OF SATUREJA MONTANA ESSENTIAL OIL CONSTITUENTS FOR BIOLOGICAL TARGETS

**Authors:** [Vuk Obrenić](#), [Đorđe Vasilic](#)

**e-mail:** [vukobrenic9537@gmail.com](mailto:vukobrenic9537@gmail.com), [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:** *Satureja Montana* (SM) is a perennial plant from the *Lamiaceae* family, originating from the heat-temperate regions of southern Europe. The pharmacological effects of SM include antimicrobial, anthelmintic, antiviral, immunostimulatory, anticancer, nonicceptive, antidiuretic, and many other effects. Combined antiviral and antimicrobial activity is of particular importance for the treatment of viruses associated with bacteria. SM constituents also act on retroviruses, so the mechanisms that prevent the spread, development and consequences of retroviruses are also important. In this work, constituents of essential oil of plant *Satureja Montana* (SM) are investigated for potential activity against retroviruses, such as *SARS CoV2* and *HIV*.

**The Aim:** Examination of constituents of SM essential oil in order to clarify their general and specific effects that may be significant in the treatment of COVID 19.

**Material and Methods:** Chemical structures of constituents (34) of essential oil are prepared and imported in *SwissTargetPrediction* program.

**Results:** Results show that constituents, with predicted probability of interaction, can interact with adenosine receptor 1, UDP-glucuronosyltransferases, receptor-dependent transport channels, peroxisome receptor activated proliferator alpha, carboanhydrases, cannabinoid receptor 2, 11b-hydroxysteroid dehydrogenases 1, acetylcholinesterases, cyclooxygenases 1, androgen receptor, zink finger protein *GLI2*, as well as some other targets.

**Conclusion:** Potential relation is considered between constituents interactions with selected targets and pharmacological activity of SM on viruses, in direct or indirect way. In this work only constituents of essential oil are investigated, and further studies should be performed on whole extract of SM, in various solvents, for more detailed view of potential of this plant in therapy of viremias.

**Keywords:** essential oil; *Satureja Montana*; *SwissTargetPrediction*; *SARS CoV2*