



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

Синтез и изучение свойств мезо-фторированных кобаламинов

В.С. Осокин, И.А.Деревеньков

*Ивановский государственный химико-технологический университет, пр.
Шереметевский 7, Иваново, Россия, e-mail: osokin.vladimir33@gmail.com*

Витамин В12 является эссенциальным соединением, необходимым для жизнедеятельности человека. Организм человека может получать этот витамин в форме цианокобаламина, который затем легко переходит в другие формы, участвующие в метаболизме. Модифицированные по корриновому макроциклу формы витамина В12 представляют интерес как активные коферменты в клетках людей с генетическими нарушениями, затрагивающими функции кобаламинов, однако их редокс-свойства изучены относительно слабо.

В данной работе были получены мезо-фторированные циано- и аквакобаламины. Мезо-фторированный цианокобаламин был получен в результате взаимодействия цианокобаламина с фторирующим реагентом. Фторированный аквакобаламин получен из цианокобаламина путём его децианирования с помощью сульфита с дальнейшим окислением сульфитного лиганда с помощью периодата натрия. Изучена кинетика реакции фторированных кобаламинов с глутатионом, восстановленным никотинамидом динуклеотидом и хлоридом титана (III). Структура модифицированных кобаламинов была оптимизирована методом DFT/M06L и базис def2-TZVP.

По результатам расчётов было найдено, что атом фтора сильно смещает электронную плотность на себя, что приводит к ослаблению связи с диметилбензимидазолом и как следствие увеличивается реакционная способность модифицированных комплексов. Определена цитотоксичность полученных комплексов на клетках крупного рогатого скота. Так же было установлено влияние мезо-фторированных кобаламинов на рост *S. aureus* ATCC 29213 при их различных концентрациях. Все полученные данные были сравнены с нативными кобаламинами.