

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2025

Cifra proiectului 25.80013.5107.20ROMD

Denumirea Proiectului Chimie redox și coordinativă nouă cu cobalamina și sisteme din clasa Cobalaminei (REDOXCOB)

Pentru perioada anului 2025 scopul proiectului a constituit explorarea reacțiilor Cbl^{3+} cu peroxizi organici și peroxoacizi.

Pentru realizarea scopului preconizat au fost trasate următoarele obiective:

- Caracterizarea reacției Cbl^{3+} cu agenți oxidanți pe bază de oxigen, precum peroxizi organici și peroxoacizi prin monitorizarea procesului de legare inițială și parametrilor cinetici ai intermediarilor
- Utilizarea aparatului chimiei computaționale pentru calcule teoretice și a tehnicilor spectrofotometriei UV-Vis și stopped-flow pentru cercetările experimentale.

În perioada vizată au fost realizate următoarele activități:

- A fost realizat calculul parametrilor computaționale (QSAR) pentru caracterizarea completă a proprietăților sterice, polarimetrice și electronice pentru Vitaminele $\text{B}_1, \text{B}_6, \text{B}_{12}$.
- Au fost calculate descriptorii electronici HOMO–LUMO pentru a estima stabilitatea și reactivitatea, oportună pentru optimizare medicinal-chimică.
- A fost determinată activitatea antioxidantă pentru compușii Lawson și DiF-59 prin decolorarea DPPH-ului, ABTS-ului.
- Au fost însușite mai multe metode moderne de calcul teoretic utilizate în chimia cuantică aplicată, inclusiv procedee de optimizare geometrică, analize de stabilitate și metode de evaluare a proprietăților structurale ale compușilor bioanorganici.
- Au fost analizate mecanismele de tip SYC (Substitution–Y–Covalent) asociate compușilor pe bază de cobalamină, cu accent pe procesele de reactivitate, transfer electronic și transformările structurale implicate în reacțiile catalizate de aceste biomolecule esențiale.

Rezultatele obținute:

- Calculul parametrilor QSAR a permis caracterizarea completă a proprietăților sterice, polarimetrice și electronice pentru compușii DiF ai lawsonului și a Vitaminelor $\text{B}_1, \text{B}_6, \text{B}_{12}$. Seria prezintă creșteri succesive ale dimensiunii și lipofilității, ceea ce ar putea favoriza permeabilitatea membranelor în teste viitoare.
- Prin calcule computaționale au fost aprofundate mecanismele moleculare relevante pentru chimia sistemelor naturale.
- Descriptorii electronici HOMO–LUMO sugerează stabilitate și reactivitate moderată, oportună pentru optimizare medicinal-chimică.
- Pe baza datelor obținute, seria DiF a compușilor Lawsonului vor fi recomandați pentru un screening biologic ulterior și analize ADMET, fără necesitatea modificărilor structurale imediate.

Rezultatele obținute au fost diseminate în cadrul celor 2 conferințe internaționale și la ședințele moldo-române comune în perioada deplasării echipei de cercetare moldave la parteneri români.

Conducătorul de proiect _____ / GLADCHI Viorica

Data: 01.12.2024

LȘ



Project number: 25.80013.5107.20ROMD

Project name: New redox and coordination chemistry with cobalamin and related systems (REDOXCOB)

For the period of 2025, the purpose of the project was to explore the reactions of Cbl^{3+} with organic peroxides and peroxyacids.

To achieve the intended purpose, the following objectives were set:

- Characterization of the reaction of Cbl^{3+} with oxygen-based oxidizing agents, such as organic peroxides and peroxyacids by monitoring the initial binding process and the kinetic parameters of the intermediates.
- Use of the computational chemistry apparatus for theoretical calculations and UV-Vis and stopped-flow spectrophotometry techniques for experimental research.

During the targeted period, the following activities were carried out:

- The calculation of computational parameters (QSAR) was carried out for the complete characterization of the steric, polarimetric and electronic properties for Vitamins B_1 , B_6 , B_{12} .
- HOMO–LUMO electronic descriptors were calculated to estimate stability and reactivity, suitable for medicinal-chemical optimization.
- Antioxidant activity was determined for Lawson and DiF-59 compounds by decolorization of DPPH, ABTS.
- Several modern theoretical calculation methods used in applied quantum chemistry were mastered, including geometric optimization procedures, stability analyses and methods for evaluating the structural properties of bioinorganic compounds.
- SYC (Substitution–Y–Covalent) mechanisms associated with cobalamin-based compounds were analyzed, with an emphasis on the reactivity, electron transfer and structural transformations processes involved in the reactions catalyzed by these essential biomolecules.

Results obtained:

- The calculation of QSAR parameters allowed the complete characterization of the steric, polarimetric and electronic properties for the DiF compounds of lawson and Vitamins B_1 , B_6 , B_{12} . The series presents successive increases in size and lipophilicity, which could favor membrane permeability in future tests.
- Computational calculations have deepened the molecular mechanisms relevant to the chemistry of natural systems.
- HOMO–LUMO electronic descriptors suggest moderate stability and reactivity, opportune for medicinal-chemical optimization.
- Based on the data obtained, the DiF series of Lawson compounds will be recommended for further biological screening and ADMET analyses, without the need for immediate structural modifications.

The results obtained were disseminated within the 2 international conferences and at the joint Moldovan-Romanian meetings during the Moldovan research team's visit to Romanian partners.

Conducătorul de proiect / GLADCHI Viorica

Data: 01.12.2025

LŞ

