

# ОБСУЖДЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕТАЛЛОСодержащих бионанок комплексов в биотехнологии на основании квантово-химических моделей их активных центров

Уварова Л.А., Романова Е.Ю.<sup>1</sup>

ФГБОУ ВПО МГТУ «СТАНКИН», Россия, 127055, Москва, Вадковский пер., д. 3А,  
<sup>1</sup>Тверской казачий технологический институт (филиал) ФГБОУ ВО «Московский  
государственный университет технологий и управления имени К.Г. Разумовского  
(Первый казачий университет)», Россия, 170100, г. Тверь, Свободный переулок, д.1Б, 8-  
920-176-77-71, E-mail: kati-v@yandex.ru

В последние десятилетия стали развиваться, такие направления как бионанотехнологии и энзимотехника, которые требуют исследований и моделирования бионаноструктуры, функциональных свойств, механизмов функционирования природных бионанообъектов. В этом плане были рассмотрены и моделировались структуры и функции бионанок комплексов, содержащих в активных центрах ионы d-металлов (Fe(II), Cu(II), Zn(II), Cr(II), Mn(II), и т.д.), относящихся к ферментативным системам [1]. Оказалось, что, не смотря на различные функции бионанок комплексов, можно выяснить универсальный квантовый механизм их «работы». У каждого фермента есть своя «программа», свой субстрат («ключ к замку»), а концепция «белок - машина» отражает, с одной стороны, уникальность металлосодержащих бионанок комплексов, а, с другой стороны, определяет их как природные наномашин, для которых управляющую роль на всех этапах функционирования играет ценная информация. Все процессы, происходящие в подобных наносистемах, волновые, самосогласованные, сводятся в итоге на квантовом уровне к донированию и акцептированию электрона в активном центре, осуществляемом по туннельному механизму. С полным основанием рассматриваемые системы можно отнести к интеллектуальным устройствам, которые можно и нужно использовать в бионанотехнологиях. Спектр их применения может быть широк: от сенсоров, датчиков, катализаторов до внутреннего транспорта энергии, информации. Естественно, сто существует проблема получить их искусственным путём, но инсулин (с ионом Zn(II) и некоторые ферментативные катализаторы с ионом Mn(II)) были получены, следовательно, в будущем возможно будет сконструировать любой необходимый металлосодержащий бионанок комплекс.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 1.7706.2017/8.9).

## Литература.

1. Васильева Л.Ю., Уварова Л.А., Романова Е.Ю. Моделирование мезо- и нанообъектов в различных средах и полях. - Тверь: ООО «Лаборатория деловой графики», 2010. - 201 с.