

## **АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ: МОДЕЛИ, ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ**

**<sup>1</sup>Васильева Л.Ю., Соловьев П.В., <sup>2</sup>Романова Е.Ю.**

Московский государственный университет печати,  
<sup>1</sup>Факультет полиграфической техники и технологий, каф. Физики, <sup>2</sup>факультет  
цифровых систем и технологий, каф. Информационных технологий  
Россия, 127550, г. Москва, ул. Прянишникова, 2а  
Тел.: (495) 976 – 39 – 87, факс: (495) 976 – 31 – 53  
E-mail: [kati.v@rambler.ru](mailto:kati.v@rambler.ru)

Биологически активные нанокластеры-ферменты самоорганизующиеся, открытые нелинейные системы, которые могут в будущем стать основой для создания наномашин. Рассматриваются ферменты, содержащие в активных центрах ионы d-металлов, которые обладают, с одной стороны, специфическими свойствами, требующими структурно-динамического соответствия между активным центром и субстратом. С другой стороны, несмотря на различные функции, структуру активных центров, металлосодержащие нанокластеры имеют много общего. Самое уникальное их свойство – информационное.

Квантово-химические модели электронной структуры активных центров биологически активных металлосодержащих нанокластеров показали, что механизм функционирования нанокластеров-ферментов универсален и состоит в удалении и поступлении электрона на одну из функциональных молекулярных орбиталей (МО) активного центра. Распределение электронов на функциональных МО представляет собой квантовое состояние, которое можно описать общей волновой функцией  $\Psi$ .

Экспериментальное исследование подобных объектов требует высокого разрешения, то есть использования инструментов нового поколения – туннельных микроскопов.

Обсуждается проблема визуализации нанообъектов-ферментов зондовой микроскопии, результаты исследования поверхности в режиме постоянного расстояния зонда над поверхностью объекта, поверхностные характеристики. Объектом исследования была выбрана пероксидаза льна.