

**КОМБИНИРОВАННЫЕ ФЕРМЕНТНЫЕ ПРЕПАРАТЫ НА ОСНОВЕ  
ГЕКСАГИСТИДИН-СОДЕРЖАЩЕЙ ОРГАНОФОСФАТГИДРОЛАЗЫ:  
БИОМОЛЕКУЛЯРНАЯ ИНЖЕНЕРИЯ И СВОЙСТВА**

**Лягин И.В., Маслова О.В., Сенько О.В., Степанов Н.А., Асланлы А.Г., Ефременко  
Е.Н.**

*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, , кафедра химической энзимологии  
elena\_efremenko@list.ru*

Молекулярное моделирование является мощным инструментом для решения различных задач в химии, биологии, медицине и т.д. Так, проводимые в настоящее время исследования в области разработки лекарств не мыслимы без привлечения компьютерных симуляций. Одновременно с этим всё большее число исследований в области биомедицины и биокатализа так или иначе используют различные наноконструкции, получаемые, в том числе, и на основе биополимеров в виде фермент-полиэлектролитных комплексов. Возможность рационального конструирования подобных нанобиокатализаторов может дать мощный толчок для развития фундаментальных исследований, которые создадут основу для прикладных исследований в медицине и сельском хозяйстве, пищевой промышленности, тонком органическом синтезе и т.д.

Объектом биомолекулярной инженерии в нашей работе был оригинальный фермент – гексагистидин-содержащая орнанофосфатгидролаза (His<sub>6</sub>-ОРН) - который давно и успешно зарекомендовала себя в качестве основы для самых разнообразных биокаталитических систем [1]. С помощью компьютерного моделирования (в т.ч. суперкомпьютерного) удалось кардинально упростить процедуру отбора партнёров для образования наноконструкций и не только сохранить, но и улучшить каталитические характеристики исходного фермента в таких комбинированных препаратах. В качестве таких партнёров были испытаны антиоксиданты [2], антибиотики [3], полимеры [4] и т.д. В результате комбинированные препараты приобретали новые каталитические свойства и уже сейчас могут быть востребованы для практического использования.

Литература:

- [1] Ефременко Е.Н., с соавт.// Научно-практическая конференция "Прикладные аспекты химической физики", г. Алексин, Тульская область, Россия, 26-29 ноября 2015.
- [2] Efremenko E.N., et al.// *J. Biochem.*, 2017, v.162(5), p.327-334.
- [3] Maslova O., et al.// *Catalysts*, 2017, v.7(9), 271.
- [4] Lyagin I.V. & Efremenko E.N.// *Biochimie*, 2018, v.144, p.115-121.