

**Д.И. Осолодкин:** Вы изложили в своём докладе огромное количество информации, однако из него так и осталось неясным, какую вы перед собой ставили цель и чего вам удалось добиться. Правильно ли я понимаю, что вы разрабатываете движок для конформационного поиска? Какие на сегодняшний день в нём реализованы функции и возможности?

**Я.В. Соловьев:** В рамках данной презентации мы хотели сделать акцент на особой важности точного представления геометрии крупных органических молекул (в частности, микропептидов) в среде растворителя. В докладе было уделено много внимания существующим подходам, которые обычно применяются при аналогичной задаче для "малой органики", чтобы показать лимитирующие факторы их прямой экстраполяции на большие структуры. Нам удалось успешно адаптировать описанный алгоритм для получения конформаций, близких к ЯМР для нескольких пептидов, однако, разумеется, требуется дополнительная верификация на б'ольший пул экспериментальных данных. В настоящий момент проект активно развивается и не является завершённым исследованием, некоторые из описанных подходов (в частности, аппроксимация энергии молекул воды) пересматриваются в пользу альтернативных решений. Несмотря на это, мы можем рекомендовать подход МД с отдельным термостатированием для получения расширенного набора геометрий изучаемого вещества в присутствии явно заданного растворителя.