

**Д.К. Нилов:** Хочу спросить по поводу выбора жесткой/подвижной модели белка при докинге. Можно ли утверждать, что одна из этих моделей является на данный момент предпочтительной? Сам я использую жесткую модель белка со сглаженным потенциалом Леннарда-Джонса (это позволяет имитировать локальную подвижность белка) и считаю данный методологический выбор обоснованным (особенно при скрининге больших библиотек соединений). Спасибо за интересную цитату Бэкона!

**В.Б. Сулимов:** Конечно, при скрининге больших баз данных есть только один способ докинга - докинг гибких лигандов в жесткий белок. В крайнем случае, можно сделать несколько моделей жесткого белка, различающихся положениями некоторых атомов или целых аминокислотных остатков, и в каждый из них проводить скрининг. Но это стоит делать, если действительно, белок и его активный центр уж очень подвижны. Уширение потенциалов - это конечно надо делать, это широко используется. Надо только не переборщить с этим уширением. А насчет потенциала Леннарда-Джонса - важно, и очень, какое силовое поле Вы используете, и насколько аккуратно ищите глобальный минимум. Раз уж Вы занимаетесь докингом, может быть Вам будет интересен наш недавно опубликованный обзор (Sulimov VB, Kutov DC, Sulimov AV. *Advances in Docking. Curr Med Chem.* 2019;26(42):7555-7580. DOI: 10.2174/0929867325666180904115000). Реально он был подготовлен 1.5 года назад - долго не публиковали после принятия к печати.