

## **Расчеты конформационной энтропии биополимеров на основании данных молекулярной динамики**

Полянский А.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова  
Российской академии наук*

<sup>2</sup>*Венский университет*

Конформационная энтропия вносит важный вклад в изменение свободной энергии в процессе взаимодействия биополимеров (например, нековалентное связывание двух белковых молекул). Мы обсудим наиболее широко используемые методики оценки конформационной энтропии на основании анализа конформационных ансамблей, полученных в ходе классических расчетов молекулярной динамики, а также обсудим новые подходы с использованием высокопроизводительных вычислений.