

**В.В. Поройков:** В комментарии к слайду 4 сказано: «Один из подходов основан на сравнении химических пространств соединений, проявляющих активность по отношению к различным мишеням (часто в качестве мишеней рассматривают белки и их лиганды)». Поясните, пожалуйста, каким образом «лиганды» рассматриваются в качестве фармакологических мишеней?

**А.А. Никитина:** В описании имелось в виду, что подход основан на сравнении химических пространств соединений, проявляющих активность, по отношению к мишеням различной природы. В известных нам работах, посвященных SEA, в качестве мишеней рассматривают белки, тогда химическое пространство активных соединений, анализируемое методом SEA, состоит из лигандов соответствующих белков. Действительно, фраза в комментарии была сформулирована неоднозначно.

**В.В. Поройков:** Сейчас у всех «на слуху» проблема с SARS-Cov-2/COVID-19. Можно ли применить разработанный Вами в данной работе метод к поиску новых противовирусных соединений в данной области и каким образом?

**А.А. Никитина:** Да, безусловно метод SEA может быть применён для поиска новых противокоронавирусных соединений. Однако, необходимо отметить, что в целом химическое пространство противокоронавирусных соединений изучено относительно мало (см., например, анализ химического пространства на основе информации из общедоступной базы данных ChEMBL <https://doi.org/10.26434/chemrxiv.12104010.v1>). Дальнейшее аккумулирование информации об активности соединений против SARS-CoV-2 и других коронавирусов позволит применить метод SEA.