

**Г.Ф. Куракин:** Меня заинтересовало упоминание базы данных ViralChEMBL. О такой базе я мечтал довольно долго. Но рабочей ссылки на неё не нашёл. Подскажите, пожалуйста, планируется ли сделать эту базу данных открытой и доступной по Сети?

**А.А. Никитина:** Ответ: процедура подготовки данных соединений, протестированных на противовирусную активность, опубликована в статье 10.1093/database/bay139. Сама выборка ViralChEMBL на данный момент доступна только в дополнительных файлах к статье и может быть использована локально с помощью MySQL сервера. По вопросу предоставления доступа к ней Вы можете обратиться к Дмитрию Осолодкину (dmitry\_o@qsar.chem.msu.ru).

**Г.Ф. Куракин:** Если ли аналогичные разработки по бактериям, такие же базы данных? По ним тоже не встречал ни баз, ни толковых сервисов предсказания мишени. Если нет таких разработок, планируете ли Вы в дальнейшем создать аналогичную базу и систему SEA-предсказания для бактерий?

**А.А. Никитина:** Аналогичные базы с противомикробной активностью мне неизвестны, однако они безусловно могут быть созданы на основе базы данных ChEMBL и других общедоступных баз данных. Мы планируем выложить код алгоритма SEA в открытый доступ, что позволит использовать его для прогнозирования любых типов биологической активности, в том числе противомикробной.

**Г.Ф. Куракин:** К сожалению, мир вирусов нам преподнёс неприятный сюрприз. Занимались ли Вы в рамках своей работы новым коронавирусом и разработкой лекарств от него?

**А.А. Никитина:** В рамках данной работы мы не занимались разработкой специфических лекарств против COVID19, вызываемого SARS-CoV-2. 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.