

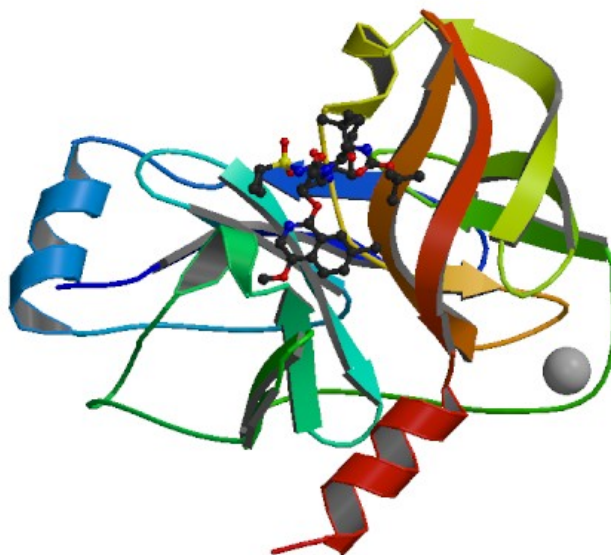
Задача о клещевом энцефалите

Клещевой энцефалит – это вирусное, природно-очаговое (характерное только для определенных территорий) заболевание с преимущественным поражением центральной нервной системы. Резервуарами и переносчиками инфекции в природе являются иксодовые клещи, распространенные в лесах почти всех стран Европы, на европейской части России и в Сибири. Однако только на территории Урала, Сибири и Дальнего Востока клещевой энцефалит является по-настоящему серьезной проблемой.

На сегодняшний день эффективных способов специфического лечения клещевого энцефалита не существует, только профилактика, то есть вакцинация и введение противоклещевого иммуноглобулина. Разработка нового противовирусного препарата - длительный и дорогостоящий процесс, и проблема клещевого энцефалита в масштабах всего мира слишком невелика, чтобы привлекать внимание крупных фармацевтических компаний. В отличие, например, от проблемы гепатита С, который недавно обогнал ВИЧ по количеству жертв. В последнее время появилось множество препаратов, нацеленных на вирус гепатита С. Часть из них уже доступна в аптеках, другие находятся на различных стадиях испытаний.

Вирусы гепатита С и клещевого энцефалита входят в одно семейство Flaviviridae, а значит, обладают похожими характеристиками, в том числе и по строению своих белков, являющихся мишенями противовирусных препаратов.

Задача заключается в том, чтобы с помощью молекулярного докинга определить, какие препараты против гепатита С имеет смысл протестировать как препараты против клещевого энцефалита. По итогам решения задачи возможна экспериментальная проверка в отделе молекулярной вирусологии флавивирусов и вирусных гепатитов ГНЦ ВБ "Вектор".



Crystal structure of hepatitis c virus protease (ns3) complexed with bms-650032 aka n-(tert-butoxycarbonyl)-3-methyl-L-valyl-(4R)-4-((7-chloro-4-methoxy-1-isoquinolinyl)oxy)-n-((1R,2S)-1-((cyclopropylsulfonyl)carbonyl)-2-vinylcyclopropyl)-L-prolinamide.