

Kristályszerkezetek vizsgálata

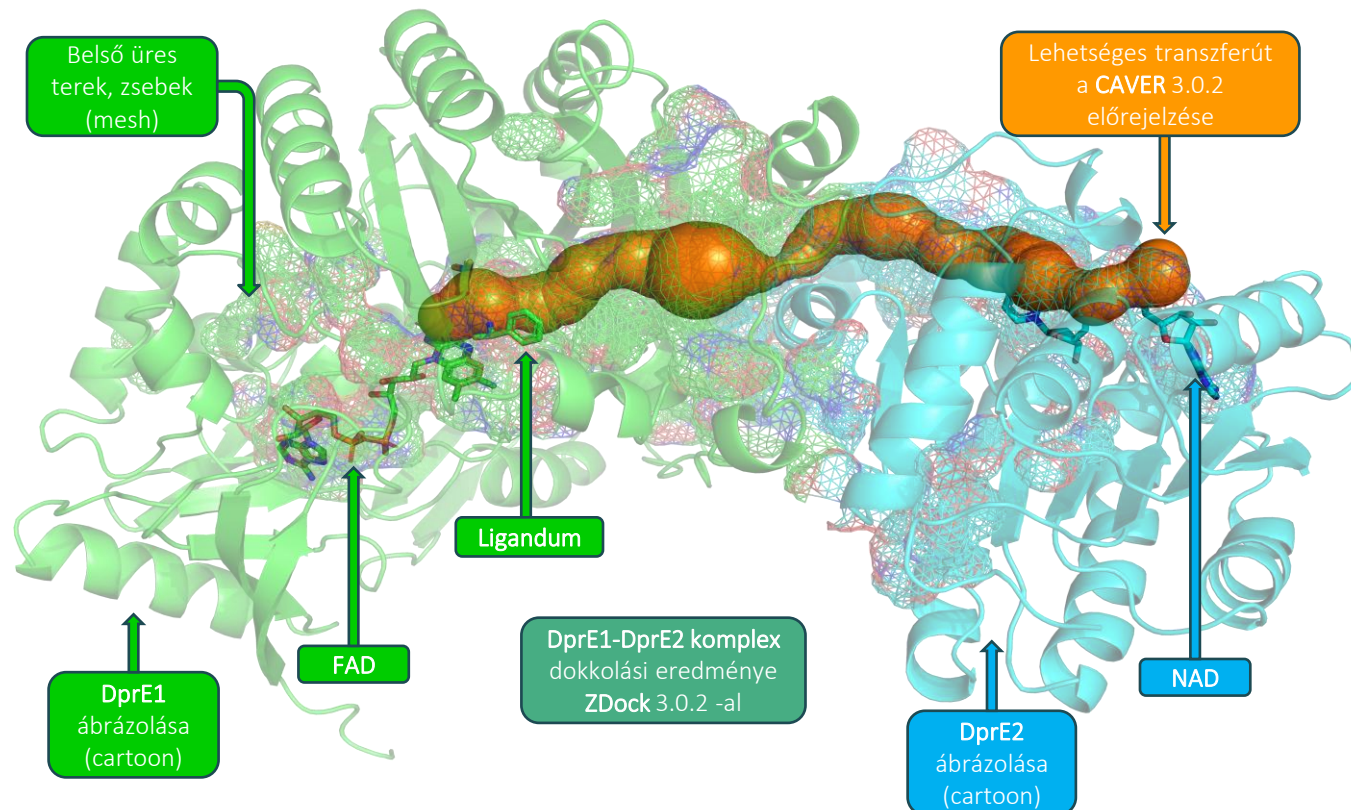
DprE2 szerkezet megbecslése

DprE1-E2 komplex dokkolása

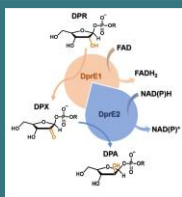
Transzfer útvonal keresése

Molekuladynamika

Transzfer modellezése (MD)



A *Mycobacterium tuberculosis* **DprE1** (balra) és **DprE2** (jobbra) epimerázainak ábrázolása (cartoon), a megfelelő kofaktorokkal (**FAD** és **NAD**), a **belső üres terek** háló (mesh) reprezentációjával, valamint a **CAVER** 3.0.2 által előrejelzett lehetséges transzferút gömbökkel (spheres) jelölve, egy a **ZDock** 3.0.2 által generált lehetséges komplexben.



**Referenciák:** <https://doi.org/10.1021/cb5007163>, <https://doi.org/10.1073/pnas.1205735109>, <https://doi.org/10.2210/pdb4PFD/pdb>, <https://doi.org/10.1038/s41598-018-31316-6>, <https://doi.org/10.1002/anie.201707324>, <https://doi.org/10.1002/jcc.24030>, <https://dx.doi.org/10.2174/092986710791959693>, <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1002708>

**Acknowledgements:** This work was supported by the BACPROBIO project, funded by European Union – NextGenerationEU and the Romanian Government, under National Recovery and Resilience Plan for Romania, contract no 760251./28.12.2023, cod PNRR-C9-18-CF92/31.07.2023, through the Romanian Ministry of Research, Innovation and Digitalization.