

Importance of the 2,6-Difluorobenzamide Motif for FtsZ Allosteric Inhibition: Insights from Conformational Analysis, Molecular Docking and Structural Modifications

Thibaut Barbier ¹, Oana Dumitrescu ^{2,3}, Gérard Lina ^{2,3}, Yves Queneau ¹ and Laurent Soullère ^{1,*}

¹ Univ Lyon, INSA Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, CPE-Lyon, ICBMS, UMR 5246, Institut de Chimie et de Biochimie Moléculaires et Supramoléculaires, Bâtiment Lederer, 1 Rue Victor Grignard, 69622 Villeurbanne, France

² Hospices Civils de Lyon, Hôpital de la Croix Rousse-Centre de Biologie Nord, Laboratoire de Bactériologie, Institut des Agents Infectieux, Grande Rue de la Croix Rousse, 69004 Lyon, France

³ Team StaPath, CIRI, Centre International de Recherche en Infectiologie, Inserm, U1111, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, UMR 5308, ENS de Lyon, 69007 Lyon, France

* Correspondence: laurent.soullere@insa-lyon.fr

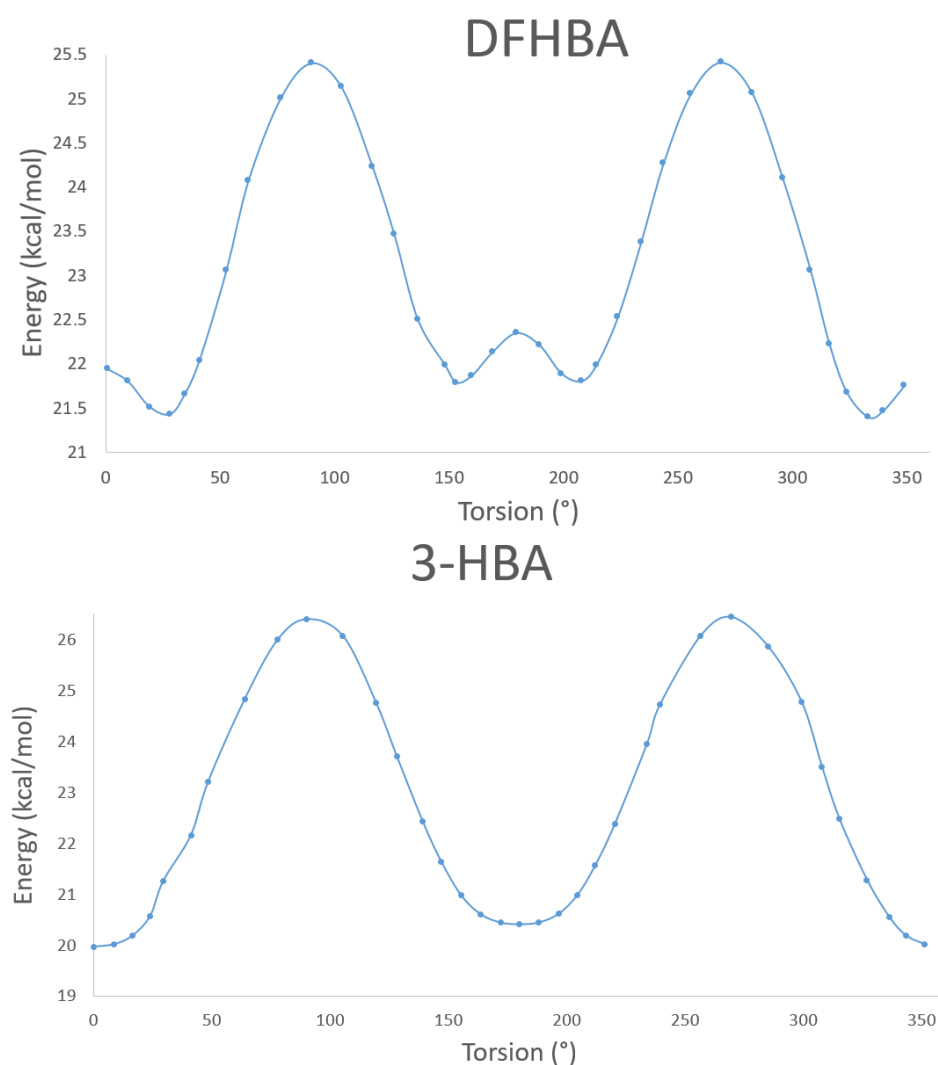


Figure S1. Conformational analysis of DFHBA and 3-HBA obtained as a result of variation of the torsion angle between the carboxamide and the phenyl group.