"Complémentarité entre approches de modélisation et de biophysique expérimentale dans la compréhension de la relation structure/activité de molécules bioactives"

Abstract

Dans notre laboratoire, nous avons développé depuis de nombreuses années des méthodes théoriques originales qui tiennent compte de l’hydrophobicité, qui permettent de prédire avec succès la relation structure/activité des molécules biologiques, particulièrement dans le cadre de molécules interagissant avec la membrane. Ces méthodes sont maintenant combinées à des approches plus proches de la réalité, telles que la dynamique moléculaire.

Plutôt que de s’intéresser à un seul type de molécule ou de processus biologique, nous avons développé une méthodologie autour du thème de la relation « structure/activité » sur base d’approches biophysiques *in silico* qu’*in vitro*. L’originalité de notre démarche se situe dans la complémentarité de ces outils biophysiques qui permettent une approche rationnelle de la relation structure/activité des molécules bioactives d’intérêt.

Cette approche complémentaire sera illustrée quant à l’étude de la spécificité lipidique de l’interaction de lipopeptides avec la membrane plasmique en tant qu’agent éliciteur des défenses des plantes.