

Projecte de Treball Fi de Màster (TFM)

Màster en Modelització Computacional
Atomística i Multiescala en Física,
Química i Bioquímica
UB/UPC

Títol	Predicció d'estructures i modes d'unió dels receptors d'odorants per un control de plagues més sostenible
Títol en anglès	Structure and binding mode prediction of odorant receptors for a more sustainable pest management

Director	Ramon Crehuet i Sergi Vela
Departament	IQAC
Universitat	CSIC
Tutor¹	Ibério Moreira

Curs	2022-23
-------------	----------------

Summary²

The use of pesticides to control insect pests is very damaging to the environment. They can be avoided in sustainable pest control based on the use of semiochemicals, such as pheromones, which are difficult to synthesise. Using deep-learning approaches the structure of odorant receptors can be predicted and new candidate molecules, pheromone analogues, can be tested in silico to ease the discovery of new active molecules.

Keywords Protein structure prediction; deep learning; integrative pest management

Breu descripció del projecte⁴

Global drivers like **climate change** and human-mediated trade and transport favor the arrival of invasive species, and the emergence and **outbreaks of insect pests**. Unpredictable pest outbreaks highlight the urgent need of setting **preventive and control measures** against newly or re-emerging pests in an Integrated Pest Management (IPM) strategy.

Semiochemical perception is mediated by olfaction, a paramount sense in insects. Each insect species expresses in their antennae a set of proteins, named **odorant receptors (ORs)** (1). Without knowing the OBP or OR structures, semiochemicals can only be directly identified from insect-produced compounds, but they are often complex organic compounds, whose **synthesis is expensive**. In addition, the screening of the biological activity of other compounds is **extremely time-consuming**, hindering the implementation of immediate control actions when an insect pest outbreaks.

The prediction of protein structures given their sequence has improved dramatically in recent years thanks to the application of deep-learning methods, resulting in efficient tools such as AlphaFold (2) or RoseTTAFold (3).

The main objective of this TFM is to identify and determine the structure of ORs of the Moroccan Locust *Dociostaurus maroccanus* with deep learning methods and using the sequences obtained in our transcriptomics analysis. A second objective is to find its binding pocket and test it against known semiochemicals as well as other candidate molecules.

1.Venthur, H. & Zhou, J.-J. Odorant Receptors and Odorant-Binding Proteins as Insect Pest Control Targets: A Comparative Analysis. *Front. Physiol.* 9, (2018).

2.Jumper, J. et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* 596, 583–589 (2021).

3.Baek, M. et al. Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network. *Science* 373, 871–876 (2021).

¹Si el director no és un professor de la UB o de la UPC, caldrà assignar un tutor del TFM que designarà la Comissió Coordinadora del Màster.

²Aquest "summary" és el que apareixerà a la futura pàgina web dedicada al TFM. Procureu que sigui concís i entenedor (màx. 10 línies).

³Aquestes "keywords" no només són les que apareixeran al web sinó que ajudaran la Comissió Coordinadora del Màster a assignar el projecte a un àrea concreta.

⁴Procureu ser concisos però proporcioneu prou informació per tal que l'estudiant i la Comissió Coordinadora del Màster es facin una idea prou acurada de en què consistirà el treball. **Indiqueu 3-6 publicacions de referència en la descripció del projecte per donar una idea dels fonament, metodologia, objectius, etc.**

Competències addicionals⁵ (opcional)

Projecte de Treball Fi de Màster (TFM)

Màster en Modelització Computacional
Atomística i Multiescala en Física,
Química i Bioquímica
UB/UPC

Requereix coneixements de python, numpy i matplotlib.

Tasques a desenvolupar ⁶		Cronograma (setmanes)																	
Tasca	Descripció	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15	16	17	18
T01	Bibliografia (aprox. 30 h)	X	X	X									X	X	X				
T02	Càlculs preliminars (aprox. 25h)			X	X	X													
T03	Escriptura de codi (aprox. 150h)				X	X	X	X	X	X	X	X							
T04	Generació i anàlisi de dades (aprox. 120h)										X	X	X	X	X				
T05	Redacció de la memòria i preparar l'exposició (aprox. 100h)															X	X	X	X

Observacions i comentaris

Per a la realització del treball pròpiament dit es preveu una dedicació d'unes quatre hores diàries durant cinc dies a la setmana, amb la opció de modificació de l'horari per poder adaptar-se millor a l'horari acadèmic de l'estudiant. Es combinarà treball presencial amb teletreball.

Signatura (el director del TFM)

Signatura (el tutor del TFM, si s'escau)

⁵ Enumereu breument qualsevol competència addicional a les competències genèriques enumerades en el Pla Docent del TFM (opcional).

⁶ Feu servir només les línies que calgui. Escolliu-les de manera que donin una idea aproximada de en què consistirà el treball i la seva distribució temporal.