



XI ENCONTRO BRASILEIRO DE ECOLOGIA QUÍMICA XI BRAZILIAN MEETING ON CHEMICAL ECOLOGY

October 23-26, 2019

Maceió, Brazil

A ECOLOGIA QUÍMICA REVERSA PERMITE EXPANDIR A LISTA DE LIGANTES EM UM INSETO DE PRAGA

Gabriela Caballero-Vidal¹, Cédric Bouyssel², Sébastien Fiorucci², Nicolas Montagné³, Jérôme Golebiowski² e
Emmanuelle Jacquín-Joly³

¹Instituto Nacional Francês de Pesquisa Agronômica (INRA), Universidade de Sorbonne, Instituto de Ecologia e Ciências Ambientais de Paris, Paris e Versalhes, França. gabriela.caballero@inra.fr; ²Instituto de Química de Nice, UMR CNRS 7272, Universidade Côte d'Azur, Nice, França. ³Instituto Nacional Francês de Pesquisa Agronômica (INRA), Universidade de Sorbonne, Instituto de Ecologia e Ciências Ambientais de Paris, Paris e Versalhes, França.

PALAVRAS-CHAVE: *Spodoptera littoralis*, RECEPTORES DE ODORANTES (OR), PREVISÃO *IN SILICO*, ELETROFISIOLOGIA, BIOCONTROLE.

RESUMO: Os insetos são expostos a essas moléculas odorantes em seu ambiente; eles contêm informações extremamente importantes para a realização de atividades essenciais, como a identificação de fontes alimentares, a localização dos locais de nidificação, a busca de parceiros sexuais ou a detecção de predadores. O reconhecimento desses compostos é feito por proteínas transmembranares chamadas receptores odorantes (OR), localizados nos neurônios sensoriais olfativos (OSN) nas antenas. Uma primeira análise funcional de um grande repertório de OR na mariposa *Spodoptera littoralis*, uma importante praga de culturas, foi realizada em nosso laboratório, fornecendo um número sem precedentes de pares ligante-receptor. Esses resultados foram usados para procurar novos ligantes em potencial por previsão *in silico*, com base no modelo Quantitative Structure Activity Relationships (QSAR). Essa abordagem já foi usada efetivamente para explorar o espaço químico das OR de mamíferos, mas seu uso em insetos permanece limitado a duas espécies modelo, o mosquito *Anopheles* e a mosca *Drosophila melanogaster*. Focada em um receptor de odorante (OR) envolvido no reconhecimento de odorantes atraentes para larvas de *S. littoralis*, a abordagem QSAR tornou possível propor uma nova gama de potenciais ligantes desse OR. A atividade desses ligantes foi então testada experimentalmente no OR alvo, expresso em um sistema heterólogo *in vivo*, usando eletrofisiologia. Os resultados mostram que a modelagem preditiva associada à experimentação é muito eficaz na expansão do espaço químico dos receptores de odor de insetos. Essa abordagem poderia, finalmente, permitir a identificação de agonistas ou antagonistas de receptores de odorantes, capazes de modificar o comportamento olfativo de pragas de insetos, abrindo novas perspectivas no biocontrole.

REVERSE CHEMICAL ECOLOGY EXPANDS THE LIST OF LIGANDS FOR A CROP PEST INSECT ODORANT RECEPTOR

KEYWORDS: *Spodoptera littoralis*, ODORANT RECEPTORS (OR), *IN SILICO* PREDICTION, ELECTROPHYSIOLOGY, BIOCONTROL.

ABSTRACT: Insects are exposed to many odorant molecules in their environment, some of them carrying important information for essential activities such as the identification of food sources, the location of nesting sites, the search for sexual partners, or the detection of predators. The recognition of these molecules is done by transmembrane proteins called odorant receptors (ORs), located in the olfactory sensory neurons in the antennae. A first functional analysis of a large OR repertoire in the moth *Spodoptera littoralis*, an important pest of crops, was conducted in our laboratory, providing an unprecedented number of ligand-receptor pairs. These results were used to search for new potential ligands by *in silico* prediction based on Quantitative Structure Activity Relationships (QSAR). Such an approach has already been used to explore the chemical space of mammalian ORs, but its use in insects remains limited to two model species, the *Anopheles* and the *Drosophila melanogaster* fly. Focused on an OR involved in the recognition of attractive odorants for *S. littoralis* larvae, the QSAR approach has made it possible to propose a new range of potential ligands of this OR. The activity of these ligands was then experimentally tested on the target OR, expressed in a heterologous system *in vivo*, using electrophysiology. The results show that computer science coupled with experimentation is very effective in expanding the chemical space of insect ORs. This approach could ultimately enable the identification of OR agonists or antagonists, capable of modifying the olfactory behavior of insect pests, opening up new perspectives in biocontrol.