

Investigadores: Rafa Ruiz Partida y Jorge Lozano Juste

Proyecto: Aplicación de la inteligencia artificial en agricultura: Mejorando la tolerancia a la sequía con pequeñas moléculas.

El agua es un recurso necesario que sostiene la vida en el planeta. Desafortunadamente, una de las consecuencias del cambio climático es el aumento en la incidencia de las sequías lo que tiene un impacto significativo en el sector agrícola. Por lo tanto, las soluciones para mejorar la eficiencia en el uso del agua en los cultivos se están volviendo cruciales para contribuir a la seguridad alimentaria. Bajo estrés por sequía, la regulación de la actividad de la subfamilia de fosfatasa tipo-2C (PP2Cs) modula la transpiración de las plantas. De hecho, ya se ha publicado ampliamente que la inactivación genética de las PP2Cs genera plantas mutantes más tolerantes a la sequía y, en consecuencia, más productivas en condiciones limitantes de agua. Sin embargo, este enfoque genético a menudo conduce a plantas con una penalización en el crecimiento y consecuentemente en la producción final. Una alternativa a este enfoque genético es el desarrollo de compuestos químicos que modulen la actividad de las fosfatasas PP2C y así de esta manera incrementar la eficiencia del uso del agua, exclusivamente en condiciones limitantes. En los últimos años, la inteligencia artificial (IA) ha surgido como una herramienta poderosa en el descubrimiento de fármacos, pero hasta ahora no se ha utilizado para mejorar la resistencia a la sequía en la agricultura. En este proyecto, proponemos diseñar compuestos químicos que inhiban directamente la actividad de PP2Cs usando IA, gracias a la precisión de los modelos de “machine learning” desarrollados por nuestros colaboradores de la empresa Belga Kantify.

La candidata o candidato ideal para este proyecto sería una persona con intereses específicos en los mecanismos moleculares de respuesta a estrés de sequía en plantas y con intereses más generales en bioquímica y estructura de proteínas. La persona seleccionada analizará la capacidad de compuestos diseñados con IA para inhibir la actividad de diferentes fosfatasas procedentes *Arabidopsis thaliana* y otras plantas de cosecha como maíz o trigo. Para ello aprenderá a purificar y trabajar con proteínas analizando su estado de oligomerización, capacidad de formación de complejos (proteína-ligando y proteína-proteína) y su actividad enzimática. Esto combinado con ensayos *in vivo* que nos permitan relacionar la información obtenida *in vitro* con un efecto significativo en la planta (ensayos de germinación, medida de conductancia estomática, activación de la respuesta génica (luminiscencia, RNAseq y qPCR) y ensayos de sequía, entre otros).

Información de contacto: raruipar@ibmcp.upv.es