

## LÍNEA

5

## BIOLOGÍA COMPUTACIONAL Y SIMULACIÓN MOLECULAR

Los investigadores que trabajan en la línea 5 aplican métodos matemáticos y de simulación computacional avanzados para estudiar procesos de comunicación intercelular, activación de canales iónicos, dinámica neuronal y redes neuronales. Entre los principales hallazgos, han descubierto recientemente un bolsillo de agua localizado en la región citoplasmática del hemicanal de conexina 26 humana que es crucial para el funcionamiento de este canal. Asimismo, han propuesto un rol para la distribución de carga en la selectividad iónica de estos canales. Por otro lado, un círculo virtuoso entre modelamiento y experimentación ha permitido la determinación de relaciones estructura-función para canales de potasio (Shaker y BK), así como para canales de calcio y TRP. En este sentido, nuestros investigadores han contribuido al entendimiento de cómo las dimensiones del poro determinan el transporte iónico en canales de potasio. A través de análisis estructurales y de secuencias, nuestros investigadores han identificado el proceso de adaptación de pingüinos viviendo en el ecuador y el polo sur. En el área de excitabilidad neuronal, nuestros investigadores han interpretado matemáticamente la contribución del canal TRPM8 a la sensación aguda del frío, generando nuevas aproximaciones al modelamiento estocástico en neurociencia.

### INVESTIGADORES PRINCIPALES

Danilo González-Nilo<sup>1</sup>, David Naranjo, Tomás Pérez-Acle<sup>2</sup>, Patricio Orio.

**INVESTIGADOR JOVEN** José Antonio Gárate (Fundación Ciencia & Vida)

**COINVESTIGADORES** Ricardo Cabrera (Universidad de Chile), Alberto J. Martín (Fundación Ciencia & Vida).

### PUBLICACIONES DESTACADAS

**Orio P**, Parra A, Madrid R, González O, Belmonte C, Viana F (2012). Role of  $I_h$  in the Firing Pattern of Mammalian Cold Thermoreceptors. *J Neurophysiol* 108(11):3009-3023.



Poblete H, Oyarzún I, Olivero P, Comer J, Zúñiga M, Sepúlveda RV, Báez-Nieto D, **González León C**, **González-Nilo FD**, **Latorre R** (2015). Molecular determinants of phosphatidylinositol 4,5-bisphosphate (PI(4,5)P<sub>2</sub>) binding to transient receptor potential V1 (TRPV1) channels. *J Biol Chem*. 290(4):2086-98.

Cornejo I, Andrini O, Niemeyer MI, Marabolí V, **González-Nilo FD**, Teulon J, Sepúlveda FV, Cid LP (2015). Identification and functional expression of a glutamate- and avermectin-gated chloride channel from *Caligus rogercresseyi*, a southern Hemisphere sea louse affecting farmed fish. *PLoS Pathog*. 290(4): 2086-98.

Araya-Secchi R, **Pérez-Acle T**, Kang S, Huynh T, Bernardin A, Garate JA, Escalona Y, **Martínez A**, García I, **Sáez JC**, Zhou R (2014). Characterization of a novel water pocket inside the human Cx26 hemi-channel structure. *Biophys J*. 107(3):599-612.

Pezo D, Soudry D, **Orio P** (2014). Diffusion approximation-based simulation of stochastic ion channels: which method to use?. *Front Comput Neurosci*. 8:139.

Escalona Y, Garate JA, Araya-Secchi R, Huynh T, Zhou R, **Pérez-Acle T** (2016). Exploring the membrane potential of simple dual-membrane systems as models for Gap-junction channels. *Biophys J*. 110(12):2678-88

Olivares E, Salgado S, Maidana JP, Herrera G, Campos M, Madrid R, **Orio P** (2015). TRPM8-Dependent Dynamic Response in a Mathematical Model of Cold Thermoreceptor. *PLOS One*. 10:e0139314.

Castillo JP, Sánchez-Rodríguez JE, Hyde HC, Zaelzer CA, Aguayo D, Sepúlveda RV, Luk LY, Kent SB, **González-Nilo FD**, Bezanilla F, **Latorre R** (2016)  $\beta$ 1-subunit-induced structural rearrangements of the Ca<sup>2+</sup>- and voltage-activated K<sup>+</sup> (BK) channel. *Proc Natl Acad Sci U S A*. 113(23):E3231-9

Díaz-Franulic, I., Sepúlveda R, Navarro-Quezada N, **González-Nilo FD** and **Naranjo D** (2015). Pore dimensions and the role of occupancy in unitary conductance of Shaker K-channels. *J Gen Physiol* 146:133-146.

Moldenhauer H, Díaz-Franulic I, **González-Nilo FD**, **Naranjo D** (2016). Effective pore size and radius of capture for K<sup>+</sup> ions in K-channels. *Sci Rep*. 6:19893.

**Naranjo D**, Moldenhauer H, Pincuntureo M and Díaz-Franulic I (2016). Pore size matters for potassium channel conductance. *J Gen Physiol* 148(4):277-91.

<sup>1</sup> Investigador de la Universidad Andrés Bello.

<sup>2</sup> Investigador de la Fundación Ciencia & Vida.