



**Universidad de  
Zaragoza**



**INSTITUTO DE BIOCOMPUTACIÓN  
Y FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS**

# **Memoria anual año 2007**

## **Índice**

- 1.- Principales actuaciones. ....pag. 2
- 2.- Funcionamiento institucional. .. pag. 3
- 3.- Organigrama de Investigación. .pag. 4
- 4.- Congresos del BIFI en 2007.....pag. 4
- 5.- El Centro de Computación y Supercomputación.....pag. 5
- 6.- El Lab. de Biología Molecular.. .pag. 7
- 7.- Nuevo edificio .....pag. 8
- 8- Ayudas obtenas.....pag .8
- 9.- Personal. Contratación .....pag 8
- 10.- Coloquios y Seminarios BIFI ...pag 9
- 11.- Convenios y Relaciones con otros centros de Investigación.....pag. 10
- 12.- Investigación. Grupos DGA...pag .10
- 13.- Proyectos de investigación.....pag. 10
- 14.- Publicaciones Científicas.....pag .10
- 15.- Líneas de investigación .....pag 11
- 16.- Tesis doctorales en 2007.....pag. 16
- 17.- Otras Actuaciones.....pag .16

### **Anexos.**

**Anexo 1. Relación de artículos científicos de miembros del BIFI en 2007.**

**Anexo 2. Relación de proyectos del BIFI y en los que participa algún miembro del Instituto en 2007.**



**Inauguración de Caesaraugusta**

# IV Memoria anual: año 2007

## Principales Actuaciones

A lo largo del año 2007 hemos continuado con el proceso de **consolidación** del BIFI como Instituto de Investigación tanto en el aspecto institucional como de funcionamiento, lo que se pone de manifiesto en los siguientes datos.

Se ha celebrado un solo **Consejo del Instituto** a lo largo del 2007, el 1 de marzo a las 19h, en el que se han aprobado las actuaciones realizadas y los proyectos más importantes a llevar a cabo en a lo largo de 2007, asimismo se reforzó el Equipo de Gobierno con un criterio de continuidad.

El **Equipo de Gobierno** ha realizado ocho reuniones formales a lo largo del año, y con motivo de la presencia de Ernesto Freire entre nosotros, realizamos una reunión sobre líneas de investigación del BIFI, con los coordinadores de las mismas el día 5 de diciembre a las 9.30h. en la Biblioteca del departamento de Bioquímica

Realizamos el **III Congreso Nacional del BIFI 2007** el 1 y 2 de marzo en la ciudad de Zaragoza, con asistencia de más de 70 investigadores relacionados, directa o indirectamente con el BIFI.

Hemos seguido ocupando los **locales** del edificio Cervantes en Corona de Aragón, en los que hemos aumentado la superficie utilizada, hemos aumentado la capacidad de computación y la seguridad del Cluster, y mejorado nuestra infraestructura de investigación experimental mediante la incorporación de nuevos aparatos al laboratorio de Biología Molecular.

El día 3 de mayo realizamos a las 12.30 h. una **jornada de puertas abiertas** dedicada al Departamento de Biología Molecular y Bioquímica, jornada que fue un éxito por la elevada participación de miembros de ese departamento y el interés que mostraron en la visita.

El programa fue: Saludo del Director del BIFI. Breve presentación del Instituto y de sus principales líneas de investigación, con énfasis en la vertiente biológica y computacional por Javier Sancho. Visita a las instalaciones del edificio Cervantes (laboratorio de biofísica, de cristalografía, cluster de ordenadores, sala 3D, etc) comentando la utilidad de los aparatos y las investigaciones en curso, y Refrigerio.

Participamos con nuestra presencia en el **Pabellón de la Ciencia** de la Feria de muestras de Zaragoza del 6 al 14 de octubre, mediante un "stand" de nuestra actividad en Proteínas y una sala en la que se mostraba al público la simulación en tres dimensiones del comportamiento del plasma en un reactor de fusión

La construcción del **nuevo edificio** para los Institutos de Investigación en el Campus del Actur financiado por el Proyecto de Infraestructuras, sigue su curso, hemos precisado nuestras propuestas de distribución del espacio del BIFI y

esperamos poder trasladarnos a las nuevas instalaciones a lo largo de este año 2008.

Hemos realizado inversiones en **infraestructuras de investigación** financiadas por el Plan de infraestructuras de investigación del MEC en Computación mediante la construcción del **ordenador dedicado "Janus"** y en Biología Molecular mediante la compra de un **espectrómetro de rayos X**, que está a la espera de ser instalado en los laboratorios del nuevo edificio.

A lo largo de 2007 se ha puesto en marcha bajo la responsabilidad del BIFI y como instalación calificada de "Singular" por el Ministerio, el **nodo "Caesaraugusta" de la "Red Española de Supercomputación"** gestionada desde el BSC (Barcelona Supercomputer Center). La instalación se ha realizado en la Facultad de Ciencias y está en funcionamiento desde el mes de noviembre de 2007, aunque estamos pendientes de la firma del Convenio entre BSC, Gobierno de Aragón y Universidad de Zaragoza.



Anabel Elduque, José Félix Sáenz y Marcelino Iglesias en la inauguración de Caesaraugusta

Hemos continuado en 2007 con la participación en dos proyectos de investigación europeos ambos relacionados con la **tecnología GRID** y que hacen que el Centro de Computación del BIFI sea nodo del GRID europeo. También hemos participado en numerosos proyectos y grupos de investigación tanto estatales como autonómicos; tres Grupos Consolidados de Investigación reconocidos por la DGA forman parte del BIFI, dos de ellos con la calificación de excelencia.

En 2007 se ha realizado con éxito el **programa "Zivis"**, en colaboración con el Ayuntamiento de Zaragoza, ENDESA y Telefónica, de puesta en marcha de un superordenador ciudadano, en el que participaron más de tres mil internautas, y con el que se han obtenido interesantes aportaciones científicas. El acto de puesta en común realizado en el mes de mayo en las instalaciones del Circo Romano de Zaragoza, fue un éxito de presencia y participación. A finales de año se ha pues-

to en marcha en colaboración con el CIEMAT, Politécnica de Valencia y CSIC el **proyecto "Ibercivis"** superordenador ciudadano que se pretende desarrollar en toda España a partir de mayo de 2008 y que será patrocinado al menos por Ibercaja, GA y los Ayuntamientos de Zaragoza y Madrid.

Se ha mantenido el **apoyo institucional** al funcionamiento del Instituto, tanto del GA, como de Ibercaja a través del convenio y otras ayudas de distintas instituciones públicas y privadas a proyectos específicos. Todo ello nos ha permitido la realización del Congreso Nacional, la contratación de investigadores y becarios, así como la inversión en las nuevas infraestructuras de los laboratorios antes señalados.

En 2007 el BIFI ha obtenido un puesto de **investigador de ARAID** que ha obtenido nuestro investigador Adrián Velázquez al que se incorporará a lo largo de 2008, también se ha incorporado un nuevo

investigador procedente del programa **Ramón y Cajal**, José Alberto Carrodegua cuyo puesto pretendemos consolidar en 2008 como investigador de la Universidad de Zaragoza, hemos obtenido ayudas del GA para la contratación de **dos técnicos** en computación para atender el nodo de la RES y hemos contratado nuevos investigadores y becarios ligados a proyectos, algunos de ellos con empresas.

Se han seguido realizando los **Coloquios BIFI**, que forman parte de un programa de doctorado con calificación de excelencia, así como los **Seminarios BIFI** con la presencia de investigadores españoles y de todo el mundo, que han mantenido el contacto y la colaboración externa.

Numerosos **artículos científicos** llevan la referencia del BIFI y hemos tenido presencia en varios Congresos nacionales e internacionales, en particular en los organizados por el Instituto.

## Equipo de Gobierno



El director José Félix Sáenz Lorenzo

## Funcionamiento Institucional

En el Consejo ordinario celebrado el 1 de marzo de 2007 a las 19 h. en el Sala del Edificio Cervantes, se aprobó la gestión del Equipo de Gobierno y el regreso de Alfonso Tarancón como Secretario del BIFI en sustitución de José Luis Alonso.

### Director

José Félix Sáenz Lorenzo ( Universidad de Zaragoza)

### Directores Científicos

Ernesto Freire ( The Johns Hopkins University Baltimore. USA)

Enzo Marinari (Universidad La Sapienza de Roma)

### Subdirector

Javier Sancho Sanz (Bioquímica, Universidad de Zaragoza)

### Secretario

Alfonso Tarancón Lafita (Física Teórica, Universidad Zaragoza)

### Resto de miembros:

José Luis Alonso Buj (Física Teórica, Universidad Zaragoza)

Fernando Falo Fornies (Materia Condensada, Universidad Zaragoza)

Mario Floría Peralta (Materia Condensada, Universidad Zaragoza)

Milagros Medina Trullenque (Bioquímica, Universidad de Zaragoza).

Adrián Velázquez Campoy (Bioquímica, Universidad de Zaragoza).

Victor Martín Mayor ( Física, U. Complutense de Madrid).

PierPaolo Bruscolini (BIFI, Física)

Yamir Moreno (BIFI Física)

Secretaría: Isabel Vidal.

## Organigrama de Investigación

### Estructura de investigación.

La coordinación de la investigación la llevan a cabo los directores científicos: Ernesto Freire y Enzo Marinari, con la colaboración de Javier Sancho, Alfonso Tarancón y José Luis Alonso. La investigación del BIFI se estructura en ocho áreas con sus correspondientes responsables de líneas de investigación, dos de los cuales tienen a su cargo los dos laboratorios de Computación y Biología Molecular.

### Líneas de investigación

Se han establecido a propuesta de los directores científicos cada una de ellas con un coordinador. La división en Líneas no debe entenderse como criterio separador, sino que en ellas debe primar el criterio de cooperación entre los grupos y la interdisciplinariedad de la investigación.

- **Materiales complejos y Fusión nuclear** (Complex Materials and Nuclear Fusion). Coordinador Víctor Martín-Mayor.

- **Redes Complejas y Sociedad** (Complex Networks and Human Society). Coordinador Yamir Moreno.

- **Física de Sistemas Biológicos** (Physics of Biological Systems).  
Coordinador PierPaolo Bruscolini.

- **Transporte y Computación Cuánticas** (Quantum Transport and Quantum Computing) Coordinador Víctor Gopar

- **Estabilidad y plegamiento de proteínas** (Protein stability and protein folding). Coordinador Javier Sancho.

- **Interacción proteína-ligando** (Protein-ligand interaction, docking and screening). Coordinador Adrián Velázquez.

- **Interacción proteína-proteína y transferencia de electrones** (Protein-protein interaction and electron transfer) Coordinadora Milagros Medina.

- **Interacción proteína DNA y regulación genética** (Protein-DNA interaction and genetic regulation) Coordinadora María Fillat.

- **Computación y Supercomputación** (Computing and SuperComputing). Coordinador Guillermo Losilla.

- **Laboratorios de Biología Molecular y Cristalografía de Proteínas** (Molecular Biology and Crystallography). Coordinadora Olga Abián.

## Congresos organizados por el BIFI en 2007.

### Congreso Internacional BIFI 2006.

Los días 1 y 2 se celebró, en el aula Magna de la Facultad de Ciencias de Zaragoza el III Congreso Nacional del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) de la Universidad de Zaragoza. En el Congreso se expusieron trabajos sobre las líneas de investigación del BIFI, por miembros del Instituto o por científicos invitados.

Comité organizador: Liliana Arrachea, Fernando Faló, Luis M. Floría, Víctor Gopar

Conferencias invitadas:

María Fillat (Universidad de Zaragoza):

*"Estudios funcionales de las proteínas Fur en cianobacterias"*

Juan Fernández-Recio (Barcelona Supercomputing Center)

*"Interacciones proteína-proteína transientes: el gran reto teórico y experimental"*

José María Sancho (Universidad de Barcelona)

*"Motores moleculares: relevancia de los mecanismos físicos y químicos"*

Álvaro Martín-Rodero (Univ. Autónoma de Madrid)

*"Efecto Josephson e interacciones magnéticas en quantum dots"*

Ángel Sánchez Sánchez (Univ. Carlos III de Madrid)

*"Comunidades y cooperación en redes sociales"*

El BIFI participó también con Yamir Moreno en la organización y desarrollo del **IV ENCUENTRO DE NEUROCIENCIAS. NEUROCIENCIA DE SISTEMAS: DE LA MOLECULA AL COMPORTAMIENTO**. Celebrado el jueves, 25 Octubre de 2007 en el Salón de Actos del Hospital Clínico Universitario de Zaragoza.

# El Laboratorio de Computación y Supercomputación

Una parte importante de los recursos computacionales del BIFI se concentra en el **Laboratorio de Supercomputación** sito en la primera planta del Edificio Cervantes.



## Cluster del BIFI

El cluster de ordenadores bajo GNU/Linux del Instituto cuenta en estos momentos con 250 procesadores, de los que el 85% son de arquitectura de doble precisión (“em64t” = 64-bit). Además se cuenta con 17 TeraBytes para espacio de almacenamiento (4TB “online” + 13TB “offline”) y la red que interconexión a los nodos usa tecnologías Gigabit Ethernet e Infiniband.

En total se cuenta con una potencia de cálculo de 3'9 TeraFLOPs, lo que lo sigue situando entre los superordenadores más potentes de España.

En diciembre de 2007 dos grupos de investigación adscritos al Instituto (Javier Sancho y Milagros Medina) han adquirido 120 nuevos procesadores que se incorporarán al cluster a principios de 2008 bajo la modalidad de “Hosting Clusters”. Con esta adquisición la potencia de cálculo del cluster se verá incrementada notablemente.

Un total de 90 investigadores poseen cuenta en el cluster, de los cuales el 60% se pueden considerar usuarios “activos” (corrieron al menos una hora de CPU en el último año). El número total de horas de CPU registrado en el *accounting* del sistema durante 2007, asciende a 799.000 horas.

## Recursos GRID

El BIFI participa en dos proyectos de investigación del Sexto Programa Marco de la Unión Europea relacionados con el desarrollo de las tecnologías grid. En ambos el Instituto aporta infraestructura computacional, alojada también en nuestro Laboratorio de Supercomputación. En concreto:

### EGEE-II

EGEE-II (“Enabling Grids for E-science II”) es un proyecto de dos años (Abril 2006 – Marzo 2008) coordinado por el CERN y financiado dentro del VI Programa Marco de la Unión Europea que pretende el desarrollo de una infraestructura Grid para uso científico disponible las 24 horas al día.

Actualmente EGEE es la mayor infraestructura Grid a nivel mundial; ya ha conectado más de 250 centros de investigación de 50 países, englobando un total de 46.000 CPUs y cerca de 40 PetaBytes (40 millones de GigaBytes) de espacio de almacenamiento.

El BIFI participa en el proyecto migrando aplicaciones de fusión al Grid y coordinando la Organización Virtual FUSION que agrupa a los usuarios que corren aplicaciones de fusión de plasma en el GRID. Actualmente existen 42 usuarios registrados en la VO FUSION.

Aunque la propuesta todavía no ha sido aprobada definitivamente por la UE, el BIFI participará en la tercera fase del proyecto: EGEE-III.

### Int.eu.grid:

25 CPUs, 2TBytes de almacenamiento y red Gigabit Ethernet interconexión

Int.eu.grid (“Interactive European Grid”) es un proyecto de dos años (Mayo 2006 – Abril 2008) coordinado por el IFCA (Instituto de Física de Cantabria) y financiado dentro del VI Programa Marco de la Unión Europea que pretende el des-

pliegue de una infraestructura grid estable orientada a aplicaciones paralelas interactivas.

El BIFI participa en el proyecto “gridificando” una aplicación visual interactiva para el diseño y simulación de reactores de fusión nuclear.

### Otros

El Laboratorio de Supercomputación también alberga equipos destinados a otros servicios generales como la web, backups, servidores de almacenamiento masivo, impresión, DHCP, SVN, CVS, NTP...

De entre ellos destaca por su éxito el “mirror” de la distribución GNU/Linux “OpenSUSE”, único mirror completo de España y cuya instalación fue financiada en 2005 a través de un convenio de colaboración con el Ayuntamiento de Zaragoza para la promoción del software libre.

A finales de 2007 se llegó a un acuerdo con el Ayuntamiento para financiar la renovación del hardware que alberga el “mirror”.

## Red Española de Supercomputación



A comienzos de 2007 la Universidad de Zaragoza pasó a formar parte de la Red Española de Supercomputación (RES), albergando uno de los siete superordenadores distribuidos por la geografía nacional con núcleo en Mare Nostrum (BSC-CNS) y conectados a través de redes de alta velocidad, que busca dar respuesta a las crecientes necesidades de computación de la investigación en España. El nodo de Zaragoza, gestionado por el BIFI,

cuenta con 512 procesadores, 24 TeraBytes de almacenamiento y red de interconexión Myrinet (más detalles en la página siguiente).

El nodo de Zaragoza en la RES llegó a estar en 2007 en la posición 417 del mundo en la lista del prestigioso top500 (<http://www.top500.org>), hoy sigue estando entre los superordenadores más potentes de España. Desde su entrada en producción el 13 de Noviembre de 2007, hasta el 31 de Diciembre, la máquina ha calculado un total 235.000 horas de CPU.

A lo largo de 2007 se han realizado varias reuniones (algunas por videoconferencia) de coordinación con el resto de integrantes de la Red Española de Supercomputación. El 18 de Diciembre se realizó una charla informativa en el Aula Magna de la Facultad de Ciencias para informar a los investigadores de la Universidad de Zaragoza sobre la puesta en marcha de CAESARAUGUSTA y los métodos para hacer uso de la infraestructura.

En los próximos meses se van a ir desplegando servicios entre los nodos de la RES que permitirán un funcionamiento operativo coordinado. Esto probablemente requerirá ampliar notablemente la conexión de Aragón a RedIRIS, dado el gran aumento en el consumo de ancho de banda que se espera.

### Sala CAESARAUGUSTA

A finales de 2007 se ha puesto en marcha el superordenador Caesaraugusta, nodo en Aragón de la Red Española de Supercomputación. La sala que alberga el ordenador está situada en la planta baja de la Facultad de Ciencias y las obras de acondicionamiento fueron llevadas a cabo durante el verano de 2007 por COBRA, empresa que ganó el concurso público convocado por el Servicio de Infraestructuras de la Universidad.

El hardware que forma Caesaraugusta está almacenado en 5 bastidores ("racks") con la siguiente

composición:

- 3 racks de computación
- 252 blades IBM JS20 con tarjeta Myrinet
- 504 procesadores PowerPC 970FX 2.2 GHz (2 procesadores/blade)
- 1TB memoria RAM (4GB/blade)
- 1 rack de gestión
- switch CISCO 6503 Gigabit Ethernet (CISCO 6503)
- 5 IBM P510 conectados por fibra a sistema almacenamiento 10TB en RAID 5 (2 FastT + 2 Exp100)
- 1 rack de networking
- switch Myrinet CLOS256



La instalación hardware de la máquina se llevó a cabo durante la semana del 1 al 5 de Octubre de 2007 y la instalación software durante la semana del 8 al 10 de Octubre. El 13 de Noviembre la máquina entró en producción con la entrada de los primeros usuarios asignados por el comité de acceso del BSC. Además se dio acceso a 5 usuarios que hacen uso del 20% de uso asignado al BIFI. Desde entonces hasta el 31 de Diciembre de 2007, en CAESARAUGUSTA se han computado 235.000 horas de CPU.

### Sala de visualización 3D

El BIFI ha desarrollado su propio sistema de visualización 3D

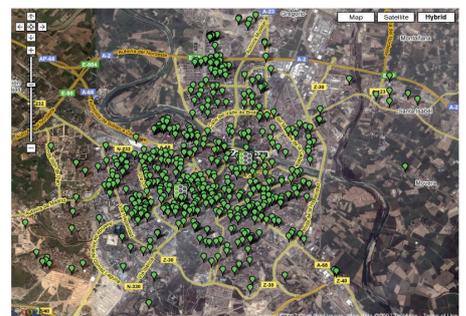


estéreo para poder ver los resultados de sus diferentes tipos de simulaciones. Aunque es posible trasladarlo a otros lugares (eventos, exposiciones...), el sistema reside habitualmente en la **Sala de Visualización 3D**, situada en la segunda planta del Edificio Cervantes.

El montaje incluye dos proyectores y una pantalla polarizada donde las imágenes se muestran usando retroproyección. También es necesario el uso de unas gafas especiales con cristales con polarización circular, para que el efecto 3D pueda ser observado.

Actualmente, las aplicaciones más interesantes son en el campo de la fusión y de la bioquímica. En el caso de la fusión, el BIFI ha desarrollado sus propios algoritmos de simulación en colaboración con el CIEMAT y las aplicaciones gráficas que los representan desde cero, contando con la colaboración interdisciplinar de físicos e ingenieros informáticos.

### Proyecto Zivis



Zivis fue un proyecto basado en tecnologías de computación voluntaria, que durante la primera mitad de 2007 desplegó con gran éxito el

primer superordenador ciudadano de España en Zaragoza.

En un periodo de apenas 6 semanas, se alcanzaron 3000 usuarios registrados, 5.200 ordenadores participantes y 700.000 horas de CPU calculadas.

### Ibercivis

Tras el éxito alcanzado por el proyecto Zivis, desde el BIFI hemos lanzado una nueva iniciativa para un nuevo proyecto nacional con importantes novedades: Ibercivis.

Además de dar el salto a escala nacional, Ibercivis pretende avanzar en el desarrollo de BOINC para crear una infraestructura estable de computación ciudadana, que sea vista por los investigadores como un cluster al que pueden enviar sus *jobs*. También el cambio de escala



implica un reto tecnológico de primer orden.

Para lograr todo ello, el proyecto cuenta con la participación de diferentes centros, cada uno de los cuales tendrá tareas específicas asignadas:

BIFI: Centro de Gestión y control del ordenador ciudadano nacional

ITACA (Univ. Politécnica de Valencia): Portar aplicaciones y desarrollo de sistema de colas.

CETA-CIEMAT(Trujillo): Centro de Almacenamiento de datos.

CETA-Moncloa (Madrid): Centro de divulgación.

Para el lanzamiento hemos considerado las aplicaciones que mejor se portan al sistema distribuido y en las que hay investigadores de primera línea involucrados. También se ha valorado el impacto social y de difusión de las investigaciones: Laboratorio Nacional de Fusión-BIFI: Simulación de Plasma en ITER

Univ. Complutense de Madrid (Dpto. Física Teórica I): Simulación de materiales.

Centro de Biología Molecular Severo Ochoa (UAM-CSIC): *Docking* de proteínas.

## El Laboratorio de Biología Molecular

### A/ Equipamiento y material

Durante el año 2007 se han incorporado al laboratorio de bioquímica y biología molecular los siguientes equipos y material de gran interés para el desarrollo de las líneas de investigación que se llevan a cabo en nuestro instituto:

1.- Difractómetro de Rayos X de Bruker con un coste de **640.888€**, financiado por el Proyecto de Infraestructura. Se trata de un equipo imprescindible para determinar la estructura tridimensional de proteínas y que será de gran utilidad en el desarrollo de las líneas de investigación que se llevan a cabo en nuestro instituto.

2.- Módulo de fluorescencia para Espectrofotómetro de Dicroísmo Circular (Chirascan de Applied Photophysics Ltd) y Cubetero de 4 posiciones para la medición múltiple de muestras. Su coste ha ascendido a **23.000€**.

3.- Prestwick Chemical Library, una nueva quimioteca de ligandos,

aportación de Javier Sancho, que será de gran utilidad en el desarrollo de las importantes líneas de investigación que nuestros grupos han abierto en la búsqueda de moléculas bioactivas frente a moléculas diana. Dicha quimioteca cuenta con la ventaja de que los 1120 compuestos que la forman corresponden a pro-fármacos en los cuales se conoce su biodisponibilidad y seguridad en humanos, con lo que si un compuesto es suficientemente potente las posibilidades de poder llevar a cabo estudios clínicos rápidamente en pacientes son muy altas.

### B/ Otros Equipos y técnicas

Destacar que durante 2007 se han incorporado al BIFI el Dr. José Alberto Carrodegas Villar y una becaria de la DGA, Violeta Lamarca Gay, que realiza su tesis doctoral bajo la dirección del primero. Dichas incorporaciones nos han permitido abrir líneas de investigación dentro de los laboratorios del BIFI hacia la **Biología Celular**. El Dr. Carrodegas ha aportado al BIFI diversos aparatos y algunas técnicas



Edificio Cervantes

nuevas. Dentro de los aparatos, se encuentra una cabina de flujo laminar y un incubador de CO<sub>2</sub> para cultivo celular, dos centrífugas de sobremesa (una de ellas refrigerada), un agitador orbital para cultivo de bacterias, un incubador termostatzado, un congelador vertical de -80°C, dos frigoríficos tipo combi y aparatos para electroforesis de proteínas y ácidos nucleicos, entre otros.

La principal técnica aportada ha sido el cultivo de células eucariotas. Basándose en ésta, y junto con el Dr. Javier Sancho, se ha conseguido un proyecto del Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud en el campo de las células madre.

## Nuevo edificio

Las obras del nuevo edificio en el Campus del ACTUR han avanzado notablemente a lo largo del 2007 de modo que el edificio estará terminado y en disposición de ser ocupado este año. Esta obra está financiada por la convocatoria de Infraestructura Científico-técnica del MCYT 2003-04. Del déficit ya en este momento previsto se harán cargo la Universidad y el Gobierno de Aragón. También se dispone de presupuesto de equipamiento del edificio.



## Ayudas obtenidas

Nos han concedido ayudas distintas instituciones públicas y privadas:

En 2007 hemos agotado la inversión pendiente del proyecto de infraestructuras 2005-06 que nos concedió una ayuda de 1.272.666 €:

549.498 € para el desarrollo de un ordenador dedicado ya desarrollado el **Ianus**.

640.888 € para el Difractómetro de Rayos X (solamente pendiente de instalación en el nuevo edificio)

82.280 € para un Sistema de purificación de proteínas (ya instalado).

El Convenio con la DGA para investigación. Fondos que utilizamos para la contratación de investigadores y becarios y para gastos de funcionamiento ordinario,

El Convenio con Ibercaja por 100.000€ ha sido destinado en su mayor parte a financiar las mejoras en infraestructura de los laboratorios.

La DGA ha aportado otras partidas para acondicionar el SAI y la iluminación de la sala Cesaraugusta del RES, con fondos procedentes de la CAI.

El proyecto Zivis ha recibido 19.396€ del ayuntamiento de Zaragoza, y el proyecto Ibercivis 40.000€ de financiación de Ibercaja.

Disponemos de unas 20 becas de investigación de ministerio, de la DGA y asociadas a proyectos para la realización de tesis doctorales.

## Personal. Contratación investigadores.

En 2007 hemos obtenido un contrato Araid para Adrián Velázquez que consolida así una línea de investigación en el BIFI, Olga Abián ha obtenido asimismo un contrato FIS (SNS) y va a seguir trabajando con nosotros, también se ha incorporado procedente del programa Ramón y Cajal, José Alberto Carrodegas cuyo puesto, junto con el de PierPaolo Bruscolini pretendemos consolidar en 2008 como investigadores de la Universidad de Zaragoza, Alejandro Rivero colaboró en el proyecto Zivis y va a seguir colaborando con el BIFI en el proyecto Ibercivis.

Angelo Rosa y Luca Rossi están haciendo el posdoc en el BIFI ambos con contratos de financiación externa.

Hemos obtenido ayudas del GA para la contratación de dos técnicos en computación para atender el Cesaraugusta nodo de la RES, labor para la que hemos contratado a Guillermo Losilla y Arturo Giner ambos ingenieros informáticos. Rubén Vallés y Fermín Serrano han seguido colaborando con el BIFI en tecnologías GRID y computación.

En 2007 el BIFI ha obtenido fondos externos para financiar contratos para proyectos de investigación con las empresas Spuderg, Cauchos Puntos y Zeu Inmunotec.

En 2007 hemos contratado a Beratriz Antolí como auxiliar administrativo del BIFI, sostenida con fondos propios.

Disponemos de unas 24 becas de investigación de distintas procedencias, dos de ellas sostenidas con fondos propios, y tres becas de iniciación a la investigación que colaboran en distintos proyectos.

## Coloquios y Seminarios BIFI

A lo largo de 2007 se han celebrado 16 Coloquios y Seminarios con participación de 17 científicos ponentes.

**Lunes 12 de febrero, 12:00 Horas, Edificio Cervantes.**

Título: "Discusión del modelo de Axelrod para el estudio de la homogeneidad/ multiplicidad cultural"  
Seminario por **Dr. Arezky Hernández Rodríguez**. Estancia pos-doctoral en el Instituto de Física de la UNAM (Méjico).

**Día 14 de febrero a las 11: 30 en Salón de Actos del EDIF CERVANTES**

Título: Reconocimiento intermolecular entre EI y fragmentos de HPr del sistema fosfotransferasa en *Streptomyces coelicolor*. Búsqueda de nuevos antibióticos.  
**Estefanía Hurtado Gómez**. Instituto de Biología Molecular y Celular (IBMC). Universidad Miguel Hernández. (Elche, Alicante)

**Día 30 de Marzo. 12 horas. Salon de Actos BIFI**

Título: "PSAS/Mtch1, una proteína proapoptótica de la membrana externa mitocondrial relacionada con transportadores de la membrana interna". **José Alberto Carrrodeguas Villar**. BIFI Universidad de Zaragoza.  
**Francisco CASTEJON** Investigador del CIEMAT

**Día: 13 de Abril. Hora: 12:00h Lugar: BIFI (Salón de Actos Edificio Cervantes)**

Título: "Molecular and structural basis of polo-like kinase 1 substrate recognition. Implications in centrosomal localization".

**Guillermo Montoya**, CNIO, Madrid

**Jueves 19 De Abril, Centro de Historia Ayuntamiento de Zaragoza, A las 19 h. Plaza San Agustín 2**

Título: "PROBLEMAS ABIERTOS EN FUSIÓN".  
**Francisco CASTEJON** Investigador del CIEMAT

**Martes 24 De Abril, En El Centro De Historia Del Ayuntamiento De Zaragoza, A Las 19 Horas, Plaza San Agustín 2**

Título: "La fusión más cercana, un sencillo experimento de bajo coste". **Vicente Queral**

**Jueves 26 de Abril. Hora: 12:00h. Lugar: BIFI (Salón de Actos Edificio Cervantes)**

Título: "MOLECULAR MOTOR PROTEINS AS ELECTROSTATIC MACHINES". **G.P. Tsironis**. Universitat de Barcelona and University of Crete and FORTH

**Viernes 4 de mayo, Hora: 12:00h. Lugar: BIFI**

Título: "VENÓMICA Y DISINTEGRINAS". **Juan J. Calvete**. Laboratorio de Proteínómica Estructural. Ins-

tituto de Biomedicina de Valencia CSIC

**Viernes 11 de mayo. Hora:12:00h. Lugar: BIFI (Salón de Actos Edificio Cervantes)**

Título: "EXCITED STATE PROPERTIES OF BIOMOLECULES: A TDDFT STUDY". **Angel Rubio**. Universidad del País Vasco y Donostia. International Physical Center

**18 de Mayo, 12:30 horas. Salon de Seminarios del BIFI**

Título: Topology and dynamics of complex biological systems **Marta Sales-Pardo** Research Associate. Northwestern Institute on Complex Systems & Dept. Chem. & Bio. Eng, USA

**Martes 5 de Junio, 12 horas, BIFI**

Título: "Networks in epidemiology" **Dr Jonathan M. Read**. Mathematics Insititute & Dept. Biological Sciences, University of Warwick, UK. And **Dr. Ken Eames**, University of Cambridge, UK

**Jueves 7 de Junio, Hora; 12, SALON DE ACTOS DEL BIFI**

TITULO: Explorando (cristalográficamente) la pared bacteriana: mecanismos de infección del neumococo.  
**Dr. Juan Hermoso**. Instituto de Fisica-Química Rocasolano, CSIC, Madrid.

**Jueves 6 de septiembre de 2007 a las 12.15 horas, Salon de Actos del Edificio Cervantes**

Título "Protein Modelling and computer-aided drug discovery". **Claudio Cavasotto** School of Health Information Sciences The University of Texas

**Jueves 13 de Septiembre, HORA: 12 horas, LUGAR: Salon Seminarios del BIFI, Edificio Cervantes**

Título: "Intercellular channels in neuronal networks of the mammalian brain."

**Prof. Daniele F. Condorelli**, Department of Chemical Sciences, University of Catania, Italy\*

**Viernes 14 de Septiembre, HORA: 12 horas, LUGAR: Salon Seminarios del BIFI, Edificio Cervantes**

Título "SYNCHRONIZATION IN COMPLEX NETWORKS: MOTIFS AND COMMUNITY STRUCTURES"

Prof. **Vito Latora**, Department of Physics, University of Catania, Italy\*

**Martes 9 de Octubre a las 12,30 h.**

TITULO: COMPORTAMIENTOS DE TIPOS PARETO Y BOLTZMANN-GIBBS E INDICE DE GINI EN UN MODELO DETERMINISTA DE MAPAS ACOPLADOS. PONENTE: **Javier González-Estévez**

## Convenios y relaciones con otros centros

El convenio de colaboración con el **CIEMAT** se desarrolla con fuerza y ha dado lugar a la presentación de varios proyectos, en los que el BIFI realiza la simulación del comportamiento del plasma en un reactor de fusión, para lo que es necesario utilizar una gran capacidad de computación y las tecnologías GRID a las que estamos asociados. Todo ello dentro del proyecto ITER de energía de fusión nuclear. El proyecto Zivis lo hemos desarrollado conjuntamente y con el Ayunta-

miento de Zaragoza.

En 2007 el BIFI ya es unidad asociada del CSIC mediante nuestra relación con el Instituto **Rocasolano** con el que las relaciones científicas son numerosas y muy fructíferas.

Sigue adelante nuestro Convenio de colaboración con **Ibercaja**, en 2007 orientado a la financiación de infraestructura de investigación de los laboratorios de Biología Molecular y Computación.

Participamos en el nodo de Bioinformática y modelado de proteínas del **Instituto Nacional de Bioinformática**.

El BIFI es Nodo de la **Red Española de Supercomputación** mediante Convenio firmado entre el BSC, el Gobierno de Aragón y la Universidad de Zaragoza a través del BIFI. También participamos en los proyectos europeos **EGEE** ("*Enabling Grids for E-science*") y en **Interactive European Grid** (*int.eu.grid*), lo que nos ha convertido en nodo español del GRID europeo y mundial.

Los miembros del BIFI participan mayoritariamente en cuatro grupos de Investigación de la DGA dos de ellos de excelencia, uno consolidado y uno emergente:

### **Título: Grupo de excelencia de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (E24/3).**

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón  
Investigador principal: Alfonso Tarancón (BIFI-UZ)  
Entidades participantes: BIFI (Universidad de Zaragoza)

## Investigación. Grupos consolidados DGA

### **Título: Grupo Consolidado: Física Estadística y No Lineal.**

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón.  
Investigador principal: L. Mario Floría

### **Título: Grupo de Excelencia: Biología Estructural y Funcional (B18)**

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón  
Investigador principal: Carlos

Gómez-Moreno

B39

Entidad financiadora: Gobierno de Aragón –

Entidades participantes: Universidad de Zaragoza, Instituto Pirenaico de Ecología (CSIC).

Duración, desde: 1/01/2004 hasta: 31/12/2007

Investigador responsable: P. CATALÁN

## Investigación. Proyectos de investigación.

La relación de proyectos de investigación se encuentra en el Anexo 2 a esta memoria.

## Publicaciones Científicas.

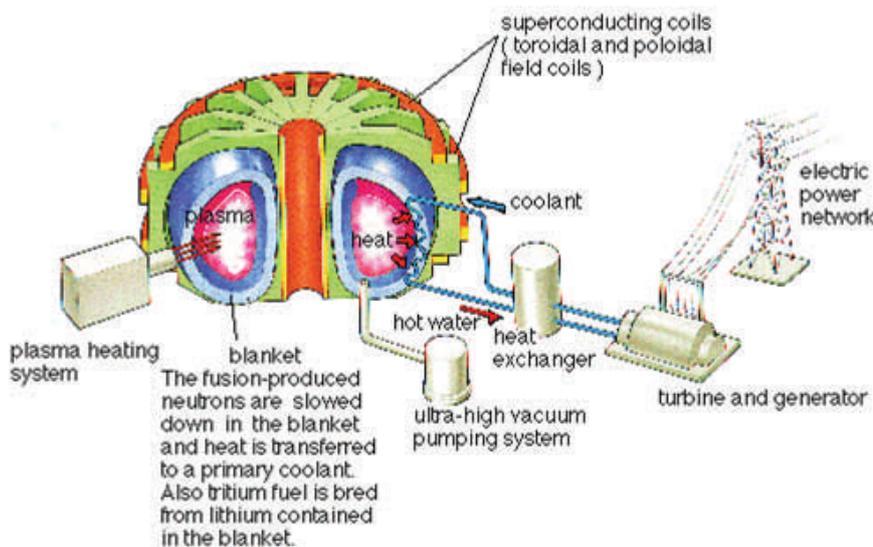
La relación de publicaciones se encuentra en el Anexo 1 a esta memoria. Hay que resaltar la diversidad y calidad de las publicaciones, y el hecho de que la mayoría de las mismas tengan carácter multidisciplinar.



En la fotografía aparecen el equipo directivo, junto con varios de los científicos investigadores que integran el BIFI

# Líneas de investigación

## Materiales complejos y Física Fundamental (Complex Materials and Fundamental Physics). Coordinador Víctor Martín-Mayor.



### Plasmas de fusión nuclear

Desde el punto de vista científico, el peso mayoritario de la investigación en España se desarrolla por el Laboratorio Nacional de Fusión (CIEMAT, Madrid), con el que el BIFI ha firmado un Convenio de colaboración.

El BIFI investiga en el campo de la simulación del Plasma dentro del reactor, debido a su experiencia en Simulaciones Numéricas y a disponer de uno de los Centros de Supercomputación mayores del País. Fruto de esta colaboración

es un código de seguimiento de órbitas mediante la ecuación de Langevin que se está aplicando a la simulación del reactor TJII del CIEMAT. Otra línea de trabajo concierne al desarrollo de modelos estocásticos para la descripción matemática del transporte de naturaleza turbulenta en plasmas confinados magnéticamente. En la actualidad, se están realizando dos tesis doctorales codirigidas por investigadores del BIFI y del Laboratorio Nacional de Fusión.

Vidrios de espín

El proyecto **SSUE/Janus (Super Spin Update Engine)**, que consiste

en la construcción de un ordenador dedicado basado en FPGA para simular modelos simples y costosos con potencia de hasta 10000 PC's, procede a buen ritmo.

Se dispone ya de tarjetas funcionantes, cuya explotación científica se ha iniciado mediante la simulación de modelos de vidrios de espín tipo Ising y Potts. Las estimaciones realizadas de tiempos característicos permiten ya asegurar que SSUE permitirá alcanzar los regímenes dinámicos apetecidos, proporcionando así una herramienta única en el mundo para el estudio de estos sistemas. Este proyecto ha permitido la profundización de la colaboración con el Centro de Excelencia italiano SMS, cuyo líder, el Prof. Giorgio Parisi ha sido galardonado recientemente con el premio Microsoft 2008. El Prof. Parisi dedicará una parte sustancial del premio a la adquisición de ordenadores Janus.

Por otro lado, el estudio de estos sistemas realizado en el cluster del BIFI, apoyado en nuevos métodos de Montecarlo ha consistido un gran éxito (que ha merecido un artículo en Phys. Rev. Lett.). Se prolongará en el primer trimestre de

2008 en la Red Española de Supercomputación, tanto en el superordenador *Marenostrum* (Barcelona Supercomputing Center) donde hemos obtenido un total de 750000 horas de cálculo, como en el nodo *Caesar Augusta* en la Universidad de Zaragoza.

*La teoría de juegos y la conducta humana :*

Se ha estudiado el efecto de considerar distintas escalas de tiempo en teorías de juegos evolutivas, mostrándose que en el caso en que la selección natural actúa rápidamente el comportamiento asintótico puede variar respecto al caso estándar, lo que tiene relevancia de cara a explicar las observaciones de los economistas experimentales. Por otro lado, se ha analizado la evolución de un dilema social clásico, el dilema del prisionero, en redes sociales reales y se ha encontrado una dependencia clave de la estructura de comunidades de las redes sociales, lo que tiene implicaciones para la emergencia de cooperación en sociedades humanas y para el diseño de redes para aplicaciones específicas.

*Efectos del desorden en sistemas magnéticos y electrónicos :*

Hemos estudiado la ausencia de autpromedio en modelos diluidos vectoriales en el punto crítico encontrando discrepancias con algunos trabajos analíticos. También hemos estudiado la transición de fase del antiferromagneto diluido en presencia de un campo magnético constante encontrando que una transición de fase de primer orden. Hemos llevado a cabo un estudio detallado de los efectos del desorden en transiciones de primer orden, en el que hemos clarificado completamente la naturaleza del diagrama de fase (estas investigaciones aparecieron en Phys. Rev. Lett.). Además hemos estudiado la dinámica fuera del equilibrio en vidrios de spin tanto en ausencia como en presencia de campos magnéticos. Finalmente hemos estudiado reacciones químicas donde las partículas siguen leyes subdifusivas.

## Transporte cuántico y computación cuántica. (Quantum Transport and Quantum Computing). Coordinador Victor Gopar

## Líneas de investigación

En cuanto al transporte cuántico en sistemas electrónicos de dimensiones de escala mesoscópica y nanoscópica, estudiamos el rol de las interacciones electrónicas en mecanismos de transporte electrónico inducido por campos alternos en bombas cuánticas de quantum dots y analizamos las propiedades del transporte directo en un anillo mesoscópico desordenado atravesado por un flujo magnético dependiente del tiempo. También estudiamos el comportamiento de la resistencia a cuatro terminales de un modelo de nanotubos de carbono basado en un cable de Tomonaga Luttinger en presencia de una impureza.

Por otro lado, hemos desarrollado un formalismo matemático utilizando la matriz de dispersión

para el estudio del transporte en sistemas donde pueden presentarse pérdidas o ganancias. La generalidad de las ideas de este formalismo es tal que puede aplicarse al estudio del transporte en sistemas macroscópicos, por ejemplo cavidades caóticas de microondas y resonadores acústicos.

Relacionado con el campo de la Computación Cuántica, hemos investigado las propiedades estadísticas del entrelazamiento de electrones en puntos cuánticos. Cabe mencionar la producción de "entanglement" o entrelazamiento es fundamental para el procesamiento de la información cuántica.

También sobre el tema de la Computación Cuántica, se ha continuado con el estudio de la Mecáni-

ca Cuántica a nivel de la Geometría Diferencial y sus aplicaciones al estudio de sistemas en dimensión finita (qubits). De este modo se han estudiado los mecanismos de reducción geométrica en el marco de la Mecánica Cuántica. Se ha estudiado la caracterización geométrica del "entanglement" en sistemas de 2 y 3 niveles, obteniendo las expresiones de los productos de Poisson y Jordan en ambos casos. Igualmente, se ha estudiado la independencia de los "entanglement witnesses" habitualmente manejados, desde un punto de vista geométrico para sistemas de dos niveles, tanto a nivel de estados puros, como a nivel de matrices densidad.

## Redes Complejas y Sociedad (Complex Networks and Human Society). Coordinador Yamir Moreno.

La línea de investigación se divide en dos áreas fundamentales: la de redes complejas y sociedad, que estudia procesos dinámicos que ocurren en estas topologías, y la de sistemas dinámicos. Los miembros o investigadores vinculados a la línea de investigación son, actualmente: Y. Moreno, L. M. Floría, F. Falo, J. G. Gardeñes, A. Arenas, A. Díaz-Guilera, J. J. Manzo, R. López-Ruiz, P. Echenique, D. Prada, J. Poncela, y S. Meloni.

### Redes Complejas y Sociedad

En el último año, hemos continuado trabajando en diferentes problemas específicos, tanto en el subtema de dinámica de redes complejas como en su caracterización topológica. Entre los estudios realizados, destacamos:

Análisis de la topología de redes reales y de nuevos modelos de redes complejas.

Sistemas dinámicos no lineales acoplados a estructuras complejas para la modelación de procesos.

Procesos de transporte y difusión con aplicaciones en redes y tecnologías de comunicaciones.

Dinámica de propagación de virus y rumores explorando la analogía entre procesos tecnológicos y biológicos.

Fenómenos de sincronización en sistemas físicos.

Surgimiento de efectos colectivos y cooperación en sistemas biológicos y fundamentalmente en entornos sociales.

Diferentes procesos y algoritmos de optimización.

Dinámica y estructura de sistemas sociales.

Específicamente, las principales tareas desarrolladas han sido las siguientes:

1. Hemos caracterizado redes reales de comunicación y sus patrones

de tráfico, así como modelos algorítmicos de transmisión de datos e información.

2. Se han estudiado modelos de propagación de información, virus informáticos y del tipo "rumores" en redes reales (Internet a nivel de sistemas autónomos y routers). Los trabajos se han dedicado al estudio de modelos matemáticos para la propagación de información no deseada y al desarrollo de algoritmos para su control.

3. Se han analizado y propuesto nuevos modelos y algoritmos de manejo de tráfico en redes, tanto reales como generadas por ordenador.

4. Hemos estudiado, utilizando modelos que incorporan tanto la topología real de redes biológicas como mecanismos no lineales apropiados para su descripción cuantitativa, la dinámica de redes celulares relevantes para procesos como la

regulación genética y el metabolismo celular.

5. Hemos caracterizado procesos dinámicos no lineales acoplados a redes complejas, analizando la relación entre la arquitectura de las mismas y procesos colectivos tales como la sincronización.

6. Se continúan explorando la aplicación y el desarrollo de diferentes técnicas analíticas.

Se han implementado algunos algoritmos de dinámica evolutiva de juegos cooperativos y de coordinación en redes sociales para estudiar el surgimiento de comportamientos

colectivos, tales como la formación de grupos de opinión, de diferentes “culturas” y la cooperación.

#### Sistemas Dinámicos

Por su parte, Ricardo López-Ruiz lleva adelante varias líneas de investigación en colaboración con diversos investigadores, tanto locales como de otras universidades. En concreto, durante 2007, diferentes trabajos han sido publicados en las siguientes líneas:

(i) *Sistemas multi-agente* en formato autómatas celulares o en formato redes complejas.

(ii) *Modelos biológicos* con mappings.

(iii) *Modelo económico* con mappings.

(iv) *Ciclos límite* en Ecuaciones de Liénard.

(v) *Complejidad estadística*

En esta línea de investigación, se ha estrechado la colaboración con investigadores externos como José Luis López (Univ. Pública de Navarra), Javier González Estévez (Univ. Nacional Experimental del Táchira, San Cristóbal, Venezuela) y Xavier Calbet (EUMETSAT, Darmstadt, Alemania).

## Física de Sistemas Biológicos (Physics of Biological Systems).

Coordinador PierPaolo Bruscolini.

### MIEMBROS

Este sector está compuesto por cuatro diferentes grupos de investigación (tres en Zaragoza y uno en Madrid), con intereses complementarios. Los investigadores activos en cada grupo son:

José Luis Alonso (catedrático de la Universidad de Zaragoza), Pablo Echenique Robba (postdoc), Pablo García Risueño (doctorando).

Fernando Falo Forniés. (Profesor Titular de la Universidad de Zaragoza), Dr. Pedro J. Martínez Ovejas (Profesor Titular de Escuela Universitaria, Zaragoza), Dr. Juan José Mazo Torres. (Profesor Titular de la Universidad de Zaragoza), Santiago Cuesta López. (actualmente postdoc en ENS Lyon), Diego Prada Gracia. (Doctorando). Pierpaolo Bruscolini (investigador Ramón y Cajal, Universidad de Zaragoza), Angelo Rosa (investigador Juan de la Cierva, Universidad de Zaragoza), María M. Cotallo Abán (doctoranda), Mauro Faccin (doctorando). Antonio Rey Gayo (Prof. Titular de la Universidad Complutense de Madrid), Ana M<sup>a</sup> Rubio Caparrós (Prof. Titular de la Universidad Complutense de Madrid), Lidia Prieto Frías (Doctoranda), María Larriva Hormigos (Doctoranda), Marta Enciso Carrasco (Doctoranda).

### INVESTIGACIÓN

Las investigaciones teóricas sobre biomoléculas se enfocan sobre todo en el estudio del plegamiento de las proteínas y de la desnaturalización del ADN. El reto es conseguir con modelos teóricos, de diferente naturaleza y complejidad, un marco explicativo y predictivo de los comportamientos de esas biomoléculas en varias condiciones experimentales, y bajo los cambios de condiciones que se pueden realizar en los experimentos o en situaciones patológicas.

Una buena modelización teórica permite por ejemplo seleccionar las mutaciones más prometedoras para estabilizar/desestabilizar una proteína, diseñar racionalmente nuevas moléculas con aplicaciones farmacológicas, estudiar cómo mutaciones patológicas afectan el comportamiento de las moléculas, y proponer posibles soluciones teóricas.

En más detalle, las actividades de investigación en este sector se desarrollan a lo largo de siete líneas principales:

a) mejora de los campos de fuerzas utilizados en las simulaciones de “resolución atómica”, para que sean a la vez sencillos de utilizar y fiables en su parecido con los resultados que se obtienen con técnicas detalladas pero mucho más

costosas de química cuántica (Alonso y Echenique);

b) análisis y mejora de los potenciales de campo medio utilizados en las simulaciones con modelos mesoscópicos simplificados (Rey);

c) estudio con modelos mesoscópicos sencillos del plegamiento de proteínas concretas, por un lado para caracterizar cinética y termodinámica del plegamiento, describir intermediarios o casos de mal plegamiento u agregación, y por otro lado, para identificar los determinantes de los comportamientos generales de las proteínas y racionalizar la enorme cantidad de datos experimentales (Bruscolini, Falo, Rey);

d) estudio detallado, con simulaciones de dinámica molecular de resolución atómica, de la respuesta de proteínas involucradas en el desarrollo de algunas enfermedades, bajo mutaciones o cambios del entorno (Falo);

e) estudio de la dinámica del ADN, con modelos simplificados y simulaciones de todos los átomos (Falo);

f) simulaciones del desplazamiento y segregación de los cromosomas en el núcleo celular (Rosa);

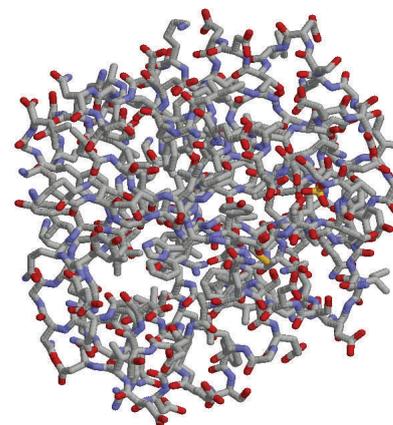
g) interpretación de espectros de masa MS/MS para la caracterización de proteínas (Bruscolini).

## Estabilidad y plegamiento de proteínas y cristalografía (Protein stability and protein folding). Coordinador Javier Sancho.

El trabajo de los distintos laboratorios del grupo durante este año ha continuado su apuesta por la biocomputación que se refleja en sus publicaciones, en diversos proyectos actualmente en marcha con soporte de la RES y en la compra de un cluster propio de 100 procesadores que se instalará en breve.

Por el lado aplicado, hemos avanzado en el desarrollo de técnicas experimentales de identificación y mejora de compuestos con actividad farmacológica (inhibidores, estabilizadores, desagregantes, etc) que nos han conducido a la realización de 5 patentes. Hemos continuado un proyecto interdisciplinar financiado por el Gobierno de Aragón en el que participan médicos involucrados en práctica clínica y químicos sintéticos, en el marco del cual planeamos perfeccionar los compuestos identificados e iniciar los ensayos preclínicos. Así mismo hemos iniciado un proyecto financiado por el Programa Aragonés de Medicina Regenerativa encaminado a la identificación de compuestos con actividad de diferenciación celular.

## Líneas de investigación



## Interacción proteína-ligando (Protein-ligand interaction, docking and screening). Coordinador Adrián Velázquez.

### DESARROLLO DE INHIBIDORES ENZIMÁTICOS ADAPTABLES.

Continúa el proyecto para el desarrollo de inhibidores potentes y adaptables de la proteasa NS3 del virus de la Hepatitis C (MEC SAF2004-07722). Actualmente no existe una terapia molecular específica y eficaz para esta enfermedad. Esta enzima ha sido confirmada como una diana terapéutica válida recientemente. Existen actualmente inhibidores experimentales, pero no hay aún inhibidores en fase pruebas clínicas. Para desarrollar inhibidores eficaces de la proteasa NS3 se empleará y extenderá la estrategia establecida mediante el estudio de los inhibidores de la proteasa HIV-1 (Dr. E. Freire, Johns Hopkins, USA), que integra información termodinámica (calorimetría), integración estructural (cristalografía y NMR) e información genética (análisis de bases de secuencias) en el proceso de optimización.

### Cribado y Diseño de Ligandos de Proteínas e Inhibidores.

El diseño y la identificación de ligandos de proteínas es una necesidad en Medicina e Industria, cuyo objetivo final es el desarrollo de nuevos fármacos y nuevas moléculas

de interés biotecnológico. Hemos desarrollando una metodología para cribado masivo experimental de quimiotecas de compuestos químicos. Ha sido aplicada con éxito en la identificación de ligandos inhibidores de flavodoxina de *Helicobacter pylori* (úlceras de estómago), en colaboración con Dr. Javier Sancho (Universidad de Zaragoza y BIFI), y ligandos rescataores de función de fenilalanina hidroxilasa (fenilcetonuria), en colaboración con Dra. Aurora Martínez (Universidad de Bergen, Noruega).

### Determinantes Termodinámicos de la Interacción de Proteína/Ligando.

La afinidad de los complejos proteína/ligando es un reflejo de las interacciones establecidas entre la proteína, el ligando y las moléculas de agua, y puede ser estudiada mediante una combinación de medidas termodinámicas e ingeniería de proteínas. Entre las herramientas empleadas destacan las calorimétricas (calorimetría isotérmica de titulación y calorimetría diferencial de barrido) y espectroscópicas (fluorescencia, dicroísmo circular, espectrofotometría). La adquisición

de un difractor de rayos X permitirá realizar estudios estructurales de complejos proteína/ligando a nivel atómico. Se están realizando estudios termodinámicos con ferredoxina-NADP+ reductasa y FAD sintetasa, en colaboración con Dra. Milagros Medina (Universidad de Zaragoza y BIFI), entre otras proteínas.

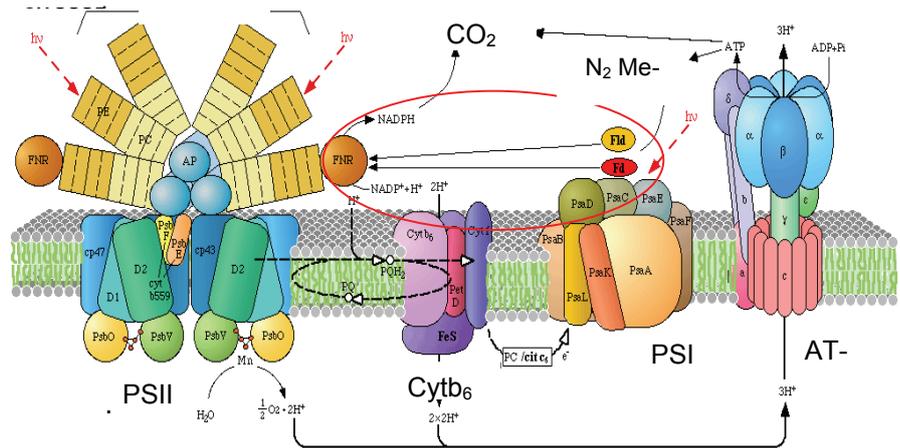
### Enfermedades Conformacionales.

Estamos investigando una enfermedad conformacional muy usual (hipercolesterolemia humana) que es causada por mutaciones en el receptor de LDL que desestabiliza los módulos responsables de la interacción con las lipoproteínas. Se está realizando una caracterización exhaustiva de la interacción entre el receptor de LDL y cationes, en particular calcio, importante para su función biológica, junto con simulaciones de dinámica molecular, en colaboración con Dr. Javier Sancho (Universidad de Zaragoza y BIFI). Posteriormente se llevará a cabo un proceso de cribado experimental de ligandos estabilizantes.

### Cooperatividad de Unión en Proteínas.

Los fenómenos cooperativos en la unión a proteínas son la base de

la regulación de la función de proteínas, señalización celular y la formación de estructuras multimoleculares. Se ha desarrollado un método exacto para caracterizar las interacciones cooperativas heterotrópicas en proteínas que permite determinar, en un único experimento, los parámetros termodinámicos de interacción cooperativa. Se ha validado la metodología con ferredoxina-NADP<sup>+</sup> reductasa y tres de sus substratos, en colaboración con Dra. Milagros Medina (Universidad de Zaragoza y BIFI).



## Interacción proteína-proteína y transferencia de electrones (Protein-protein interaction and electron transfer) Coordinadora Milagros Medina.

**Flavoproteínas.** Los procesos de transferencia de electrones donde intervienen proteínas redox en general, y flavoproteínas en particular, son responsables del mantenimiento de muchas funciones vitales y, en muchos casos resultan de gran interés para la síntesis industrial de compuestos con actividad biológica. Nuestra investigación se centra tanto en el estudio de los mecanismos de reconocimiento proteína-proteína y proteína ligando como en los procesos de transferencia de

electrones e hidruro en proteínas dependientes de flavina.

### Sistemas Proteicos Estudiados

La cadena de transporte de electrones de la Ferredoxina-NADP<sup>+</sup> reductasa (FNR) de *Anabaena* en la fotosíntesis.

La proteína responsable de la síntesis de flavinas en procariontes: La FAD sintetasa El sistema de la Adrenodoxina reductasa responsable de la producción de hormonas esteroides.

La Ferredoxina (flavodoxina)-

NADP<sup>+</sup> reductasa bacteriana (FPR)

La Aryl alcohol oxidasa

### Metodología:

Medidas de Interacción Proteína-Proteína y Proteína-ligando

Medida de Potenciales Oxido-Reducción.

Evaluación de la Capacidad de Transferir Electrones en estado estacionaria y resuelta en el tiempo mediante mezcla rápida con flujo detenido y espectrometría cinética inducida por pulso de láser.

Resolución de Estructuras Tridimensionales por Difracción de Rayos X.

Métodos Computacionales: Docking y Dinámica Molecular.

Las proteínas de la familia Fur (ferric uptake regulator) son reguladores globales de la transcripción en procariontes. En bacterias heterótrofas, Fur se encarga de mantener la homeostasis de hierro, está implicada en procesos de patogenicidad y es una proteína esencial en los mecanismos de adaptación y protección frente a diversos tipos de estrés. Existen diferencias significativas en la estructura y el mecanismo de actuación de los miembros de esta familia. Especialmente, el conocimiento sobre este tipo de reguladores en cianobacterias es relativamente escaso. Nuestro grupo está implicado en la caracterización estructural y funcional de las proteínas Fur presentes en cianobacterias, así como en el estudio de su regulación y la identificación de

## Interacción Proteína-DNA y regulación genética (Protein-DNA interaction and genetic regulation). Coordinadora: Maria F. Fillat

nuevas funciones de esta familia en microorganismos fotosintéticos, particularmente su papel en la síntesis de cianotoxinas y su relación con los procesos de fotosíntesis, fijación y asimilación de nitrógeno.

Nuestro equipo está trabajando en la consecución de estos objetivos mediante dos sublíneas de actuación claramente diferentes:

**1.- Coordinada por María Fillat:** Caracterización estructural y funcional de reguladores transcripcionales de la familia Fur, en la que se abordan los siguientes problemas: Identificación y caracterización de proteínas Fur en cianobac-

terias.

Estudio de la interacción DNA-proteína. Caracterización de redes reguladoras

**2- Coordinada por M. Luisa Peleato:** Aplicaciones biotecnológicas de péptidos producidos por cianobacterias

La experiencia en conocimientos sobre metabolitos secundarios de cianobacterias nos permite desarrollar aspectos aplicados de interés biotecnológico

Desarrollo de test de identificación y valoración de péptidos tóxicos. Oxidación de péptidos tóxicos.

## Tesis doctorales leídas en 2007

### **Doctor: Nunilo Cremades**

Título de la Tesis: La flavodoxina de *Helicobacter pylori*: Paisaje conformacional e identificación de inhibidores específicos.

Fecha de su lectura: Diciembre de 2007

Director Javier Sancho.

### **Doctor: Emma Sevilla Miguel**

Título de la Tesis: Estudio de factores que inciden en la síntesis de microcistina en *Microcystis aeruginosa* PCC 7806 y diseño de un kit para su cuantificación

Fecha de su lectura: Octubre 2007. Directora M. L. Peleato

### **Doctor: Sara López-Gomollón**

Título de la Tesis: La familia Fur (ferric uptake regulador) en la cianobacteria *Anabaena* PCC 7120: Estudio de su regulación y caracte-

rización bioquímica de FurB y FurC.

Fecha de su lectura: Octubre 2007.

Directora M. L. Peleato

### **Doctor: Susana Frago**

Título de la Tesis: Biosíntesis de FMN y FAD en procariontes y modulación de las propiedades de óxido-reducción del FMN por el entorno proteico

Fecha de su lectura: Octubre 2007.

Directora: Milagros Medina

### **Doctor: Sara Cuenda Cuenda.**

Título: Secuencia genética y dinámica de excitaciones no lineales en ADN.

Universidad: Universidad Carlos III de Madrid. Facultad/Escuela: Politécnica Superior.

Director: Anxo Sanchez. Año: 2007 (29 de junio).

### **Doctor: David de Sancho Sánchez**

Título de la Tesis: Evaluación de potenciales de plegamiento de proteínas con algoritmos genéticos. Fecha de su lectura: 11-VII-2007.

Director: A. REY

### **Doctor: Estefanía Hurtado Gómez**

Título: Caracterización Estructural, Plegamiento Y Reconocimiento Intermolecular de EI y Fragmentos de HPR del Sistema Fosfotransferasa En *Streptomyces Coelicolor*. Búsqueda de Nuevos Antibióticos. Universidad: Universidad Miguel Hernández de Elche.

Fecha: 21/06/2007.

## Otras actuaciones

### **Colaboraciones con empresas**

Hemos mantenido la colaboración con las empresas **Spuderg, Schnell, Cauchos Puntos, OX-CTA** y con **Zeus Inmunotec** con las que estamos realizando proyectos de investigación e innovación tecnológica.

Como consecuencia de la colaboración con la empresa Zeus-Inmunotec se ha desarrollado un test para detección y valoración de péptidos tóxicos producidos por cianobacterias que en este momento esta comercializándose.

Como consecuencia de la colaboración con la empresa OX-CTA, y en el marco de un proyecto CEDETI se ha puesto a punto métodos eficaces de destrucción por oxidación de péptidos tóxicos en aguas de consumo y ganadero.



**El Presidente de la Comunidad Autónoma, D. Marcelino Iglesias Ricou haciendo unas declaraciones a la prensa después de la inauguración del Congreso, en presencia del director del BIFI, José Félix Sáenz Lorenzo y del Rector de la Universidad de Zaragoza**

## Anexos

**Anexo 1. Relación de artículos científicos de miembros del BIFI en 2007.**

**Anexo 2. Relación de proyectos del BIFI y en los que participa algún miembro del Instituto en 2007.**

## ANEXO I

### RELACIÓN DE ARTICULOS CIENTÍFICOS DE MIEMBROS DEL BIFI PUBLICADOS EN 2007

F. Castejón, L.A. Fernández, J. Guasp, V. Martín-Mayor, A. Tarancón, J.L. Velasco. Ion kinetic transport in the presence of collisions and electric field in TJ-II ECRH plasmas. *Plasma Physics and Controlled Fusion* (2007) 49:753-776. Cita BIFI

Maiorano, V. Martín-Mayor, J.J. Ruiz-Lorenzo, A. Tarancón. Weak first-order transition in the three-dimensional site-diluted Ising antiferromagnet in a magnetic field. *Physical Review B* (2007) 76:064435. Cita BIFI

F. López-Tejeira, S.G. Rodrigo, L. Martín-Moreno, F.J. García-Vidal, E. Devaux, T.W. Ebbesen, J. R. Krenn, I. Radko, S. Bozhevolnyi, M.U. Gonzalez, J.C. Weeber, A. Dereux. Efficient unidirectional nanoslit couplers for surface plasmons. *Nature Physics (Letter)* (2007) 3:324-328.

P. Bruscolini, A. Pelizzola, M. Zamparo. Rate determination factors in protein model structures. *Physical Review Letters* (2007) 99:038103. Cita BIFI

R. López-Ruiz, F. Luis, A. Millán, C. Rillo, D. Zueco, J.L. García-Palacios. Nonlinear response of single-molecule magnets: field-tuned quantum-to-classical crossover. *Physical Review B* (2007) 75:012402. Cita BIFI

J. Gómez-Gardeñes, M. Campillo, L.M. Floría, Y. Moreno. Dynamical Organization of Cooperation in Complex Topologies. *Physical Review Letters* (2007) 98:108103. Cita BIFI

R. López-Ruiz, Y. Moreno, A.F. Pacheco, S. Boccaletti, D.U. Hwang. Awakening and Sleeping of a Complex Network. *Neural Networks* (2007) 20:102-108. Cita BIFI

J. Poncela, J. Gómez-Gardeñes, L.M. Floría, Y. Moreno. Robustness of Cooperation in the Evolutionary Prisoner's Dilemma on Complex Networks. *New Journal of Physics* (2007) 9:184. Cita BIFI

J. Gómez-Gardeñes, Y. Moreno, A. Arenas. Paths to Synchronization in Complex Networks. *Physical Review Letters* (2007) 98:034101. Cita BIFI

10.R. Chacón, P.J. Martínez. Controlling Chaotic Solitons in Frenkel-Kontorova Chains by Disordered Driving Forces. *Physical Review Letters* (2007) 98:224102.

J. Gómez-Gardeñes, Y. Moreno, A. Arenas. Synchronizability determined by coupling strengths and topology on Complex Networks. *Physical Review E* (2007) 75:066106. Cita BIFI

S. Cuesta-López, F. Falo, J. Sancho. Computational diagnosis of protein conformational diseases: Short molecular dynamics simulations reveal a fast unfolding of r-LDL mutants that cause familial hypercholesterolemia. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* (2007) 66:87-95. Cita BIFI

L.M. Floría, Y. Moreno, J. Gómez-Gardeñes. The Modelling of Biological Networks. In "Physics of Complex Systems and Life Sciences", ed. by M.A.F. Sanjuán (Research Signpost 2007). Cita BIFI

E. Hurtado-Gomez, M. Caprini, A. Prieto, J.L. Neira. The helical structure propensity of the first helix of the histidine phosphocarrier protein of *Streptomyces coelicolor*. *Protein and Peptide Letters* (2007) 14:281-290. Cita BIFI

D. Quintero, Z. Velasco, E. Hurtado-Gomez, J.L. Neira, L.M. Contreras. Isolation and characterization of a thermostable b-xylosidase in the thermophilic bacterium *Geobacillus pallidus*. *Biochimica et Biophysica Acta* (2007) 1774:510-518. Cita BIFI

J.A. Poveda, G. Fernandez-Ballester, M. Prieto, J.L. Neira. Dynamics of tryptophan in the histidine-containing phosphocarrier protein of *Streptomyces coelicolor*: evidence of multistate equilibrium unfolding. *Biochemistry* (2007) 46:7252-7260. Cita BIFI

L.A. Alcaraz, M. Alamo, F.N. Barrera, M.G. Mateu, J.L. Neira. Flexibility in hiv-1 assembly subunits: solution structure of the monomeric c-terminal domain of the capsid protein. *Biophysical Journal* (2007) 93:1264-1276. Cita BIFI

Czypionka, O. Ruiz de los Paños, M.G. Mateu, F.N. Barrera, E. Hurtado-Gomez, J. Gomez, M. Vidal, J.L. Neira. The isolated c-terminal domain of Ring1B is a dimer made of stable well-structured monomers. *Biochemistry* (2007) 46:12764-12776. Cita BIFI

S. Cuesta-López, F. Falo, J. Sancho. Computational diagnosis of protein conformational disease: Short MD simulations reveal a fast unfolding of r-LDL mutants that cause Familial Hipercolesterolemia. *Pro-*

teins: *Structure, Function and Bioinformatics* (2007) 66:87-95. Cita BIFI

C.M. Romero, J.M. Lozano, J. Sancho, G.I. Giraldo. Thermal stability of  $\alpha$ -lactoglobulin in the presence of aqueous solution of alcohols and polyols. *International Journal of Biological Macromolecules* (2007) 40:423-428. Cita BIFI

M. St. Maurice, N. Cremades, M.A. Croxen, G. Sisson, J. Sancho, P.S. Hoffman. Flavodoxin: Quinone Reductase (FqrB): A Redox Partner of Pyruvate: Ferredoxin Oxidoreductase that Reversibly Couples Pyruvate Oxidation to NADPH Production in *Helicobacter pylori* and *Campylobacter jejuni*. *Journal of Bacteriology* (2007) 189:4764-4773. Cita BIFI

M. Bueno, C.J. Camacho, J. Sancho. Simple estimate of the free energy change due to aliphatic mutations: superior predictions based on first principles. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* (2007) 68:850-862. Cita BIFI

M. Martínez-Júlvez, N. Cremades, M. Bueno, I. Pérez-Dorado, C. Maya, S. Cuesta-López, D. Prada, F. Faló, J.A. Hermoso, J. Sancho. Common conformational changes in flavodoxins induced by FMN and anion binding: the structure of *H. pylori* apoflavodoxin. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* (2007) 69:581-594. Cita BIFI

P.S. Hoffman, G. Sisson, M.A. Croxen, K. Welch, W.D. Harman, N. Cremades, M.G. Morash. Antiparasitic drug nitazoxanide inhibits the pyruvate oxidoreductases of *Helicobacter pylori*, selected anaerobic bacteria and parasites, and *Campylobacter jejuni*. *Antimicrobial Agents and Chemotherapy* (2007) 51:868-876. Cita BIFI

N. Cremades, A. Velázquez-Campoy, E. Freire, J. Sancho. The Flavodoxin from *Helicobacter pylori*: Structural Determinants of Thermostability and FMN Cofactor Binding. *Biochemistry* (2008) 47:627-639. Publicado on-line Diciembre 2007. Cita BIFI

N. Cremades, M. Bueno, J.L. Neira, A. Velázquez-Campoy, J. Sancho. Conformational Stability of *Helicobacter pylori* Flavodoxin: Fit to function at pH 5. *Journal of Biological Chemistry* (2008) 283:2883-2895. Publicado on-line Noviembre 2007. Cita BIFI

F. Moro, S.G. Taneva, A. Velázquez-Campoy, A. Muga. GrpE N-terminal domain contributes to the interaction with Dnak and modulates the dynamics of the chaperone substrate binding domain. *Journal of Molecular Biology* (2007) 374:1054-1064. Cita BIFI

S. López-Gomollón, J.A. Hernández, C.P. Wolk, M.L.

Peleato, M.F. Fillat. Expression of *furA* is modulated by NtcA and strongly enhanced in heterocysts of *Anabaena* sp. PCC 7120. *Microbiology* (2007) 153:42-50. Cita BIFI

J.A. Hernández, S. Pellicer, L. Huang, M.L. Peleato, M.F. Fillat. FurA modulates gene expression of *alr3808*, a DpsA homologue in *Anabaena* sp. PCC7120. *FEBS Letters* (2007) 581:1351-1356. Cita BIFI

S. López-Gomollón, J.A. Hernández, S. Pellicer, V. Espinosa-Angarica, M.L. Peleato, M.F. Fillat. Cross-talk between iron and nitrogen regulatory networks in *Anabaena* (Nostoc) sp. PCC 7120: Identification of overlapping genes in FurA and NtcA regulons. *Journal of Molecular Biology* (2007) 374:267-281. Cita BIFI

V.B. Tognetti, M.D. Zurbriggen, E.N. Morandi, M.F. Fillat, E.M. Valle, M.R. Hajirezaei, N. Carrillo. Enhanced plant tolerance to iron starvation by functional substitution of chloroplast ferredoxin with a bacterial flavodoxin. *Proceedings of the National Academy of Sciences USA* (2007) 104:11495-11500.

C.P. Roca, J.A. Cuesta, A. Sánchez. The importance of selection rate in the evolution of cooperation. *European Physical Journal Special Topics* (2007) 143:51-58. Cita BIFI

J.A. González, S. Cuenda, A. Sánchez. Kink dynamics in spatially inhomogeneous media: The role of internal modes. *Physical Review E* (2007) 75:036611. Cita BIFI

S. Ares, A. Sánchez. Modelling disorder: the cases of wetting and DNA denaturation. *European Physical Journal B* (2007) 56:253-358. Cita BIFI

Sánchez. Una aproximación al ADN: Biofísica de moléculas individuales, Mecánica Estadística y Matemáticas. *Boletín de la Sociedad Española de Matemática Aplicada* (2007) 40:7-42.

Sánchez. Sistemas complejos: la ciencia del siglo XXI. En "Matemáticas en la Comunidad de Madrid: Computación e Interacción I+D+i", editado por M. De León, J.L. González-Llavona, L.A. Ibort y E. Zuazua (Publicaciones de la Consejería de Educación de la Comunidad de Madrid, 2007).

J.M. Sancho, A.H. Romero, A.M. Lacasta, K. Lindenberg. Langevin dynamics of A+A reactions in one dimension. *Journal of Physics, Condensed Matter* (2007) 19: 065108.

R. Reigada, F. Sagués, J.M. Sancho. Kinetics and spatial organization in reactive systems with nonpassively advected reactants. *Journal of Physics, Condensed Matter* (2007) 19:065132.

- K. Lindenberg, J.M. Sancho, A. M. Lacasta, I.M. Sokolov. Dispersionless transport in a washboard potential. *Physical Review Letters* (2007) 98:020602.
- A. Gomez-Marin, J.M. Sancho, J. Garcia-Ojalvo. Self-sustained spatiotemporal oscillations induced by membrane-bulk coupling. *Physical Review Letters* (2007) 98:168303.
- F. Sagués, J.M. Sancho, J. García-Ojalvo. Spatiotemporal order out of noise. *Review Modern Physics* (2007) 79:829-882.
- A.H. Romero, A.M. Lacasta, J.M. Sancho, K. Lindenberg. Numerical study of  $A+A \rightarrow 0$  and  $A+B \rightarrow 0$  reactions with inertia. *Journal of Chemical Physics* (2007) 127:174506.
- V. Chandran, L. Poljak, R. Núñez-Miguel, J. Fernandez-Recio, J. Parkinson, C. Burns, A.J. Carpousis, B.F. Luisi. Recognition and cooperation between the ATP-dependent helicase RhlB and ribonuclease RNase E. *Journal of Molecular Biology* (2007) 367:113-132.
- D. Fernández, J. Vendrell, F.X. Avilés, J. Fernández-Recio. Structural and functional characterization of binding sites in metallopeptidases based on ODA analysis. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* (2007) 68:131-144.
- T.M.K. Cheng, T.L. Blundell, J. Fernández-Recio. pyDock: electrostatics and desolvation for effective scoring of rigid-body protein-protein docking. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* (2007) 68:503-515.
- J. Fort, L.R. de la Ballina, H.E. Burghardt, C. Ferrer-Costa, J. Turnay, C. Ferrer-Orta, I. Usón, A. Zorzano, J. Fernández-Recio, M. Orozco, M.A. Lizarbe, I. Fita, M. Palacín. The structure of human 4F2hc ectodomain provides a model for homodimerization and electrostatic interaction with plasma membrane. *Journal of Biological Chemistry* (2007) 282:31444-31452.
- D. Bonivento, D. Pontiggia, A.D. Matteo, J. Fernandez-Recio, G. Salvi, D. Tsernoglou, F. Cervone, G.D. Lorenzo, L. Federici. Crystal structure of the endopolygalacturonase from the phytopathogenic fungus *Colletotrichum lupini* and its interaction with polygalacturonase-inhibiting proteins. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* (2007) 70:294-299.
- S. Grosdidier, C. Pons, A. Solernou, J. Fernandez-Recio. Prediction and scoring of docking poses with pyDock. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* (2007) 69:852-858.
- V. Lamarca, A. Sanz-Clemente, R. Pérez-Pé, M.J. Martínez-Lorenzo, N. Halaihel, P. Muniesa, J.A. Carrodegas. Two isoforms of PSAP/Mtch1 share two proapoptotic domains and multiple internal signals for import into the mitochondrial outer membrane. *American Journal of Physiology-Cell Physiology* 293:C1347-1361. Cita BIFI
- M.A. Lanaspá, H. Giral, S. Breusegem, G. Baile, J. Catalán, J.A. Carrodegas, N. Halaihel, N. Barry, M. Levi, V. Sorribas. Interaction of MAP17 with NHERF3/4 induces translocation of the renal type Iia Na/Pi transporter to the trans-Golgi. *American Journal of Physiology-Renal Physiology* (2007) 292:F230-242.
- R.F. Alvarez-Estrada. Nonequilibrium quasi-classical effective meson gas: Thermalization. *European Physical Journal A* (2007) 31:761-765.
- J.A. Almendral, A. Díaz-Guilera. Dynamical and spectral properties of complex networks. *New Journal of Physics* (2007) 9:187. Cita BIFI
- J. Tejero, J.R. Peregrina, M. Martínez-Júlvez, A. Gutiérrez, N.S. Scrutton, C. Gómez-Moreno, M. Medina. Catalytic mechanism of the hydride transfer between NADP+/H and Ferredoxin NADP+-reductase from *Anabaena* PCC 7119. *Archives of Biochemistry and Biophysics* (2007) 459:79-90. Cita BIFI
- M. Medina, R. Cammack. ENDOR and related EMR methods applied to flavoprotein radicals. *Applied Magnetic Resonance* (2007) 31:457-470. Cita BIFI
- S. Frago, G. Goñi, B. Herguedas, J.R. Peregrina, A. Serrano, I. Perez-Dorado, R. Molina, C. Gómez-Moreno, J.A. Hermoso, M. Martínez-Júlvez, S.G. Mayhew, M. Medina. Tuning of the FMN binding and oxido-reduction properties by neighboring side chains in *Anabaena* Flavodoxin. *Archives of Biochemistry and Biophysics* (2007) 467:206-217. Cita BIFI
- D. de Sancho, A. Rey. Evaluation of Coarse Grained Models for Hydrogen Bonds in Proteins. *The Journal of Computational Chemistry* (2007) 28:1187.
- L. Prieto, A. Rey. Influence of the Chain stiffness on the thermodynamics of a Gō-type model for protein folding. *The Journal of Chemical Physics* (2007) 126:165103.
- L. Prieto, A. Rey. Influence of the native topology on the folding barrier for small proteins. *The Journal of Chemical Physics* (2007) 127:175101.
- M. Pimentel, E. Sahuquillo, P. Catalán. Genetic diversity and spatial correlation patterns unravel the biogeographical history of the European sweet vernal grasses (*Anthoxanthum* L., Poaceae). *Molecular Phylogenetics and Evolution* (2007) 44:667-684.
- J.G. Segarra-Moragues, M. Palop-Esteban, F. González-Candelas, P. Catalán. *Nunatak* survival versus *tabula rasa* in the Central Pyrenees, a study on the endemic plant species *Borderea pyrenaica* (Dioscoreaceae). *Journal of Biogeography* (2007) 34:1893-1906.
- A. Quintanar, S. Castroviejo, P. Catalán. Phylogeny of *Aveneae* (Poaceae) inferred from nuclear and plastid DNA sequence analysis. *American Journal of Botany* (2007) 94:1554-1569.
- E. Pérez-Collazos, J.G. Segarra-Moragues, L.A. Inda, P. Catalán. Population genetics and the conservation status of the threatened Iberian steppe grass *Puccinellia pungens* (Pau) Paunero. *Botanical Journal Linnean Society* (2007) 154:269-281.
- J.G. Segarra-Moragues, L. Villar, J. López, E. Pérez-Collazos, P. Catalán. A new Pyrenean hybrid

*Cirsium* (Asteraceae) as revealed by morphological and molecular analyses. *Botanical Journal of the Linnean Society* (2007) 154:421-434.

P. Catalán, E. Pérez-Collazos, J.G. Segarra-Moragues, L.A. Inda. Bases genéticas para la conservación de la flora amenazada de Aragón I (*Borderea chouardii*, *Vella pseudocytisus* subsp. *pau*, *Krascheninnikovia ceratoides*). *Conservación Vegetal* (2007) 11:15-17.

L.A. Inda, J.G. Segarra-Moragues, J. Müller, P.M. Peterson, P. Catalán. Dated historical biogeography of the temperate Loliinae (Poaceae, Pooideae) grasses in the northern and southern hemispheres. *Molecular Phylogenetics and Evolution* publicado on-line Diciembre 2007.

V. Lafont, A.A. Armstrong, H. Ohtaka, Y. Kiso, L.M. Amzel, E. Freire. Compensating enthalpic and entropic changes hinder binding affinity optimization. *Chemical Biology and Drug Design* (2007) 69:413-422.

K. Hidaka, T. Kimura, Y. Tsuchiya, M. Kamiya, A.J. Ruben, E. Freire, Y. Hayashi, Y. Kiso. Additional interaction of allophenylnorstatine-containing tripeptidomimetics with malarial aspartic protease plasmepsin II. *Bioorganic Medicinal Chemistry Letters* (2007) 17:3048-3052.

S. Muzammil, A.A. Armstrong, L.W. Kang, A. Jakalian, P.R. Bonneau, V. Schmelmer, L.M. Amzel, E. Freire. Unique thermodynamic response of tipranavir to human immunodeficiency virus type 1 protease drug resistance mutations. *Journal of Virology* (2007) 81:5144-5154.

R. Szoszkiewicz, S.R. Ainarapu, A.P. Wiita, R. Perez-Jimenez, J.M. Sanchez-Ruiz, J.M. Fernandez. Dwell Time Analysis of a Single-Molecule Mechanochemical Reaction. *Langmuir* publicado on-line Noviembre 2007.

P. Wiita, R. Perez-Jimenez, K.A. Walther, F. Gräter, B.J. Berne, A. Holmgren, Sanchez-J.M. Ruiz, J.M. Fernandez. Probing the chemistry of thioredoxin catalysis with force. *Nature* (2007) 450:124-127.

A.L. Pey, D. Rodriguez-Larrea, S. Bomke, S. Dammers, R. Godoy-Ruiz, M.M. Garcia-Mira MM, J.M. Sanchez-Ruiz. Engineering proteins with tunable thermodynamic and kinetic stabilities. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* publicado on-line Octubre 2007

J.M. Sanchez-Ruiz. Ligand effects on protein thermodynamic stability. *Biophysical Chemistry* (2007) 126:43-49.

**Artículos publicados: 72**

**Artículos que citan BIFI: 37**

## ANEXO 2- 2007

### Investigación. Proyectos de investigación.

#### A. Proyectos vinculados al Instituto.

##### I.- Proyectos Europeos

**1.- TITULO DEL PROYECTO:** Enabling Grid for Science (EGEE-II)

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Unión Europea -VI Programa Marco Contract number 031688.

**Duración:** Subvención concedida (2006-2007),

**Cuantía:** 110.000 euros.

**Investigador Principal en Aragón:** A. Tarancón

**2.- TITULO DEL PROYECTO:** Interactive European Grid.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Unión Europea -VI Programa Marco Contract number 031857.

**Duración** (2006-2007) **Cuantía:** 90.000 euros.

**Investigador Principal en Aragón:** A. Tarancón.

**3.- TITULO DEL PROYECTO:** Plasmio-Nano-Devices.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Unión Europea: UE (NoE-FP6-2002-IST-1-507879).

**Duración:** desde Enero 2004 hasta Diciembre 2007.

**Coordinador:** Alain Dereux. **Investigador principal:** Luis Martín Moreno.

**4.- TITULO DEL PROYECTO:** Plasmon Enhanced Photonics.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Unión Europea: UE (STREP-NMP4-CT-2005-034506).

**Duración:** Septiembre 2006 hasta Agosto 2009. **Coordinador:** Ross Stanley. **Investigador principal:** Luis Martín Moreno.

**5.- TITULO DEL PROYECTO:** Enabling Grid for Science (EGEE-II)

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Unión Europea -VII Programa Marco Contract number (Pendiente de asignación).

**Duración:** (2008-2009). **Cuantía:** 105.000 Euros.

**6.- TITULO DEL PROYECTO:** Global Approach to Brain Activity (GABA).

**ENTIDAD FINANCIADORA:** European Union, NEST Pathfinder Call. Node Subcontracted.

**Duración:** 2007-2009 **Cuantía:** 20.000 euros.

**Investigador Principal:** Yamir Moreno Vega

**(Coordinador:** J. Garcia-Ojalvo, UPC).

##### II.- Proyectos Nacionales

- 1.- TITULO DEL PROYECTO:** Fotónica en Superficies Metálicas.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** Plan Nacional de I+D+I. (MAT 2005-06608-C02-2)  
**Duración:** desde 2006 hasta 2008.  
**Investigador principal:** Luis Martín Moreno.
- 2.- TITULO DEL PROYECTO:** Generalized Lagrangian and Hamiltonian Techniques for Geometric Control Theory.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** MEC and FCT (Portugal).  
**Duración:** 2007-2008.  
**Investigador Principal:** J. Clemente.
- 3.- TITULO DEL PROYECTO:** Complejidad en Proteínas, Redes y Sistemas de Muchos Agentes.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** MEC FIS2006-12781-C02-01.  
**Participantes:** BIFI-Universidad de Zaragoza, Universidad Complutense de Madrid.  
**Duración:** 2006-2009.  
**Investigador Principal:** P. Bruscolini.
- 4.- TITULO DEL PROYECTO:** Complejidad en Materiales y Fenómenos de Transporte Clásico y Cuántico.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** MEC-FIS2006-08532-C03-02. **Cuantía:** 111.320 euros. **Participantes:** Proyecto Coordinado con La Univ. Complutense de Madrid y la Universidad de Extremadura.  
**Investigador Principal:** A. Tarancón
- 5.- TITULO DEL PROYECTO:** Grupo de Excelencia: Biología Estructural y Funcional.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** DGA. Código:  
**Participantes:** UNIZAR  
**Duración:** 2005-2008. **Cuantía:**  
**Investigador Principal y Coordinador:** Carlos Gómez-Moreno.
- 6.- TITULO DEL PROYECTO:** Desarrollo y Optimización de Nuevos Inhibidores Preclínicos contra *Helicobacter pylori*: una Aproximación Multidisciplinar.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** DGA. Código: PM076/2006  
**Participantes:** UNIZAR e I+CS  
**Duración:** 2006-2008. **Cuantía:** 51357.00 euros  
**Investigador Principal y Coordinador:** Javier Sancho
- 7.- TITULO DEL PROYECTO:** Principios de Estabilidad Conformacional de Proteínas, Análisis Estructural y Energético de Conformaciones no Nativas e Identificación de Ligandos Bioactivos.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** MEC. BFU2007-61476/BMC
- Duración:** 2008-2010. **Cuantía:** 263000.00 euros  
**Investigador Principal y Coordinador:** Javier Sancho
- 8.- TITULO DEL PROYECTO:** Identificación de Compuestos Químicos Capaces de Inducir Diferenciación Celular Específica a partir de Células Madre Embrionarias de Ratón.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** I+CS. PIPAMER07/02  
**Participantes:** UNIZAR  
**Duración:** 2007-2009. **Cuantía:** 16000.00 euros  
**Investigador Principal y Coordinador:** Javier Sancho.
- 9.- TITULO DEL PROYECTO:** Nuevas Funciones de Proteínas Fur (Ferric Uptake Regulator) en Cianobacterias.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Educación y Ciencia. Plan Nacional de I+D+I. Código:  
**Participantes:** Universidad de Zaragoza  
**Duración:** Enero 2007 hasta diciembre 2009.  
**Investigador Principal y Coordinador:** Maria Luisa Peleato Sánchez.
- 10.- TITULO DEL PROYECTO:** Respuesta de un Tapete Microbiano de Cianobacterias a la Contaminación por Hidrocarburos.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** Proyectos Interreg. Departamento de Economía, Hacienda y Empleo de la Diputación General de Aragón.  
**Participantes:**  
**Duración:** 2006-2007. **Cuantía:**  
**Investigador Principal:** María F. Fillat Castejón.
- 11.- TITULO DEL PROYECTO:** Síntesis de Complejos de Oro y Plata con Biomoléculas Dirigidas al Diseño de Especies Biológicamente Activas.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** Proyectos multidisciplinares. Diputación General de Aragón.  
**Participantes:**  
**Duración:** del 2007 al 31 de diciembre de 2009.  
**Investigador Principal:** Maria Concepción Gimeno Floría.
- 12.- TITULO DEL PROYECTO:** Sistemática, Evolución y Biogeografía de los Linajes Basales de la Subtribu Loliinae y Transferencia Horizontal de Genes en la Supertribu Aveneae-Poeae (Gramineae).  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Ciencia y Tecnología - CICYT. Proyecto CGL2006-00319/BOS.  
**Participantes:** Universidad de Zaragoza, Universidad de Coruña, Centro de Investigación contra la Desertificación (CSIC), Indiana University. (8 participantes).  
**Duración:** desde 2006 hasta 2009. **Cuantía:** 100.000 euros

**Investigador Principal:** Pilar Catalán Rodríguez.

**13.- TITULO DEL PROYECTO:** Convergencia Evolutiva Transcontinental y Genética de la Conservación de los Ñames Enanos (Dioscoreaceae) Críticamente Amenazados (Borderea, Epipetrum).

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Fundación BBVA

**Participantes:** Universidad de Zaragoza, Instituto Pirenaico de Ecología (CSIC), Centro de Investigación contra la Desertificación (CSIC), Universidad del Comahue. (4 investigadores participantes)

**Duración:** desde 1/07/2006 hasta 31/06/2009. **Cuantía:** 180.000 euros.

**Investigador Principal:** Pilar Catalán Rodríguez.

**14.- TITULO DEL PROYECTO:** Estudio Biogeográfico del Área de Doñana y Caracterización de Especies Singulares.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Junta de Andalucía. Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa - Proyecto 2006-8474.

**Participantes:** Universidad de Sevilla, Universidad de Zaragoza. (7 investigadores participantes).

**Duración:** Desde 2007 hasta 2009. **Cuantía:** 185.363 euros.

**Investigador Principal:** B. Valdés.

**15.- TITULO DEL PROYECTO:** Estudio Taxonómico y Evolutivo de *Valerianella* (Valerianaceae).

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Acción Complementaria del MCYT 2005 (CGL2005-25122-E).

**Participantes:** Universidad de Córdoba, Universidad de Zaragoza, Universidad de Extremadura. (4 investigadores participantes).

**Duración:** desde 1/04/2006 hasta 31/03/2007. **Cuantía:** 20.000 euros

**Investigador Principal:** J. A. Devesa.

**16.- TITULO DEL PROYECTO:** Grupo de Investigación Consolidado: "Física Estadística y no Lineal"

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Diputación General de Aragón. Código:

**Participantes:**

**Duración:** 2003-2007.

**Investigador Principal:** Luis Mario Floría.

**17.- TITULO DEL PROYECTO:** "Teoría y Simulación de Sistemas Complejos"

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Educación y Ciencia.

**Participantes:**

**Duración:** 2005-2008.

**Investigador Principal y Coordinador:** Fernando Faló.

**18.- TITULO DEL PROYECTO:** Red Temática: "Aplicaciones de la Física Estadística y No Lineal a la Economía y Ciencias Sociales".

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Educa-

ción y Ciencia.

**Participantes:**

**Duración:** 2005 -2007

**Coordinador Local:** Yamir Moreno. **Coordinador de Red:** Albert Díaz-Guilera.

**19.- TITULO DEL PROYECTO:** Mecanismos Moleculares de Proteínas de la Membrana Externa Mitochondrial Similares a Transportadores Implicadas en Apoptosis. Papel en Enfermedades Degenerativas y en Cáncer.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** MEC. BFU2006-07026.

**Participantes:** Universidad de Zaragoza.

**Duración:** 2006-2009. **Cuantía:** 85000 euros

**Investigador Principal y Coordinador:** José Alberto Carrodegua Villar.

**20.- TITULO DEL PROYECTO:** Biofísica de Proteínas Implicadas en Procesos de Transporte en Organismos Fotosintéticos.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** DGA. PM062/2007.

**Participantes:** Universidad de Zaragoza.

**Duración:** Nov 2007 - Oct 2009. **Cuantía:** 57000 euros. **Investigador Principal y Coordinador:** Milagros Medina.

**21.- TITULO DEL PROYECTO:** Mecanismos de Acción en Flavoproteínas Redox. Versatilidad, Adaptación y Rediseño con Fines Biotecnológicos de las Propiedades de la Flavina en el Entorno Proteico.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Dirección General de Investigación. Ministerio de Educación y Ciencia. BIO2004-00279.

**Participantes:** Universidad de Zaragoza.

**Duración:** Diciembre 2004-Diciembre 2007. **Cuantía:** 70.000 euros.

**Investigador Principal:** Dr. Milagros Medina

**22.- TITULO DEL PROYECTO:** Aplicación de Técnicas Computacionales y Nano-biológicas al Estudio de los Mecanismos de Reacción en Proteínas.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Diputación General de Aragón. PIP122/2005.

**Participantes:** Universidad de Zaragoza.

**Duración:** Diciembre 2005- Diciembre 2007. **Cuantía:** 47.575 euros.

**Investigador Principal y Coordinador:** Dr. Milagros Medina.

**23.- TITULO DEL PROYECTO:** Flavoproteínas y Flavoenzimas: Transformación de Energía y Dianas Farmacológicas.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Dirección General de Investigación. Ministerio de Educación y Ciencia. BIO2007-65890-C02-01.

**Participantes:** Universidad de Zaragoza.

**Duración:** 2007-2010. **Cuantía:** 129.000 euros

**Investigador Principal y Coordinador:** Dr. Milagros

Medina.

**24.- TITULO DEL PROYECTO:** Biofísica de Proteínas Implicadas en Procesos de Transporte en Organismos Fotosintéticos.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Dirección General de Investigación, Innovación y Desarrollo. Diputación General de Aragón. PM062/2007

**Participantes:** Universidad de Zaragoza/CSIC/CONICET/UAB/BSC

**Duración:** Diciembre 2007- Diciembre 2009. **Cuantía:** 57.120 euros.

**Investigador Principal y Coordinador:** Dr. Milagros Medina.

**25.- TITULO DEL PROYECTO:** Nuevas Estrategias para el Estudio de las Interacciones Proteína-Ligando: Estudios Estructurales, Cinéticos y Nanomecánicos.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Educación y Ciencia. BIO2006-09178-C02-01.

**Participantes:** Universidad de Zaragoza.

**Duración:** 2007- 2009. **Cuantía:** 113.740 euros.

**Investigador Principal y Coordinador:** Dr. Carlos Gómez-Moreno.

**26.- TITULO DEL PROYECTO:** Simulación del Plegamiento y Agregación de Proteínas.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Educación y Ciencia. FIS2006-12781-C02-02.

**Participantes:** BIFI y Universidad Complutense de Madrid. **Duración:** 3 años (2007-2009). **Cuantía:** 22000 euros (UCM)

**Investigador Principal y Coordinador:** Antonio Rey Gayo / Pierpaolo Bruscolini.

**27.- TITULO DEL PROYECTO:** Simulación de Sistemas Poliméricos Complejos y Proteínas.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Comunidad de Madrid – UCM. 910068 (Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación).

**Participantes:** BIFI y Universidad Complutense de Madrid.

**Duración:** 1 año (2007). **Cuantía:** 6000 euros.

**Investigador Principal y Coordinador:** Antonio Rey Gayo / Pierpaolo Bruscolini.

### III.- Proyectos con Empresas

**1.- TITULO DEL PROYECTO:** Integración de Algoritmos Complejos de Distribución en Sistemas ERP. **Empresas Participantes:** Proyecto Innovaragón en el Sector de Automoción de Colaboración del BIFI con la Empresa Cauchos Puntos.

**Duración:** 2007-2008. **Cuantía:** 30.000 euros.

**Investigador Principal y Coordinador:** A. Tarancón.

**2.- TITULO DEL PROYECTO:** Desarrollo de un

Nuevo Compuesto Biocida Biodegradable para Control y Eliminación de Patógenos en el Agua.

**Empresas Participantes:** CDTI-OX Compañía tratamientos de aguas S.L.

**Duración:** 1 de noviembre de 2005 al 31 de diciembre de 2007. **Cuantía:**

**Investigador Principal y Coordinador:** Maria Luisa Peleato Sánchez.

**3.- TITULO DEL PROYECTO:** Validación de un Test para la Detección de Microcistina en Aguas de Boca.

**Empresas Participantes:** OTRI-Zeu Inmunotec.

**Duración:** 6 de noviembre de 2006 al 5 de mayo de 2007. **Cuantía:**

**Investigador Principal y Coordinador:** Maria Luisa Peleato Sánchez.

### IV.- Proyectos Infraestructura (Fondos FEDER)

**1.- TITULO DEL PROYECTO:** Desarrollo de un ordenador dedicado basado en FPGA.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** FEDER-MEC UN- ZA05-33-003

**Duración:** 2005-2007. **Cuantía:** 552.148 euros.

**Investigador Principal:** A. Tarancón.

#### Aragón

**2.- TITULO DEL PROYECTO:** Grupo de Excelencia de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** DGA E24/3

**Duración:** 2005-2007.

**Subvención concedida en 2006:** 26.270 euros.

**Subvención concedida en 2007:** 29.800 euros.

**Investigador Principal:** A. Tarancón.

### V.- Colaboraciones y Convenios con otros Organismos

**1.- Proyecto ZIVIS:** Simulación del TJ-II en un Supercomputador ciudadano en Zaragoza.

**Proyecto de Colaboración Laboratorio Nacional de Fusión LNF-CIEMAT.**

**Subvención concedida en 2007:** 11.600 Euros. **Investigador Principal:** A. Tarancón

**2.- Convenio de colaboración con el CIEMAT para el estudio del Plasma en Fusión.**

**Proyecto de colaboración Universidad de Zaragoza-CIEMAT, que establece al BIFI como Unidad Asociada al CIEMAT.**

**3.- Proyecto ZIVIS:** Creación de un Supercomputador ciudadano en Zaragoza.

**Proyecto en colaboración con el Ayuntamiento de Zaragoza.** Año 2007.

**Cuantía:** 32000 Euros. **Investigador Principal:** A. Tarancón.

## B. Proyectos en los que participan miembros del BIFI

**B1.- TITULO DEL PROYECTO:** Physics of Risk.**ENTIDAD FINANCIADORA:** Unión Europea (COST Actions). **Duración:** desde 1/01/2004 hasta 31/12/2007. **Investigador Principal:** Peter Richmond (**Representantes de España en el Management Committee:** Maxi San Miguel y Anxo Sánchez).

**Número de participantes:** Grupos de trece países europeos. **Cuantía:** 300 000 euros.

**B2.- TITULO DEL PROYECTO:** Biotecnología de las Interacciones Beneficiosas Planta Microorganismo. **ENTIDAD FINANCIADORA:** VII Red Temática. (Acciones Complementarias) MEC. Código: **Duración:** Enero 2006 hasta diciembre 2007. **Cuantía:** **Investigador Principal y Coordinador:** Manuel Sánchez Díaz

**B3.- TITULO DEL PROYECTO:** Caracterización por Resonancia Magnética Nuclear del Extremo C-Terminal del Receptor Vaniloide y de las Proteínas Hélice-Lazo- Hélice Implicadas en el Crecimiento del Sistema Neuronal.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2005/00360-BQU.

**Participantes:** Instituto de Biología Molecular y Celular, Universidad Miguel Hernández.

**Duración:** 2005-2008.

**Cuantía:** 75000 euros.

**Investigador Principal:** José L. Neira.

**B4.- TITULO DEL PROYECTO:** Caracterización Estructural y Modelado de Interacciones entre Proteínas Mediante Simulaciones Computacionales de Docking a Escala Proteómica.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio Educación y Ciencia. BIO2005-06753.

**Participantes:** Parc Científic de Barcelona.

**Duración:** Oct 2005 - Oct 2008. **Cuantía:** 47600 euros. **Investigador Principal y Coordinador:** Juan Fernández Recio.

**B5.- TITULO DEL PROYECTO:** Modelización, Simulación y Análisis de Sistemas Complejos (MOSAICO).

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Educación y Ciencia, Proyectos Eje C.

**Participantes:** 20.

**Duración:** desde 1/10/2006 hasta 30/09/2011. **Cuantía:** 442 000 euros. **Investigador Principal:** Anxo Sánchez.

**B6.- TITULO DEL PROYECTO:** Optimización y Diseño de Nano-Rectificadores Superconductores y Magnéticos basados en el Efecto Ratchet.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Acción estratégica de Nanociencia y Nanotecnología, Ministerio de Educación y Ciencia (NAN2004-09087-C03-03).

**Participantes:** 4. **Duración:** desde el 1/01/2006 hasta el 31/12/2008.

**Cuantía:** 45 000 euros.

**Investigador Principal:** Juan M. R. Larrondo.

**B7.- TITULO DEL PROYECTO:** Modelización Matemática y Simulación Numérica en Ciencia y Tecnología (SIMUMAT).

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Programa de actividades entre grupos de la Comunidad de Madrid.

**Participantes:** 30 de grupos de distintos centros de Madrid. **Duración:** desde el 1/01/2006 hasta el 31/12/2009.

**Cuantía:** 803 063 euros.

**Investigador Principal:** Enrique Zuazua.

**B8.- TITULO DEL PROYECTO:** Teoría Cuántica de Campos y Aplicaciones a Física de Altas Energías.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Educación y Ciencia. FPA004-02602 (Plan Nacional de Física de Partículas y Aceleradores).

**Duración:** Dic.2004-Dic. 2008 (por haber sido prorrogado un año, del 2007 al 2008)

**Cuantía:** 179800 euros (incluyendo 17700 euros de costes indirectos, es decir, "overhead").

**Investigador Principal y Coordinador:** Fernandez Alvarez-Estrada, Ramón.

**B9.- TITULO DEL PROYECTO:** Grupo de Excelencia Biología Estructural.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Diputación General de Aragón. B18.

**Participantes:** Universidad de Zaragoza.

**Duración:** 2005-2007. **Cuantía:** 31.000 €/año

**Investigador Principal y Coordinador:** Dr. Carlos Gómez-Moreno.

**B10.- TITULO DEL PROYECTO:** Nanociencia Molecular.

**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Educación y Ciencia. CONSOLIDER CSD2007-00010.

**Participantes:** Numerosos laboratorios de universidades y CSIC.

**Duración:** 5 años (2007-2011). **Cuantía:** 5750000 euros.

**Investigador Principal y Coordinador:** Eugenio Coronado Miralles.

**B11.- TITULO DEL PROYECTO:** Diffusion Optimization in Social Networks.

**Empresas :** IBM (Entidad Financiadora).

**Participantes:** 7.

**Duración:** 1/04/2007 hasta 31/03/2009.

**Cuantía:** 50 000 euros.

**Investigador Principal:** Esteban Moro. **Patente:** No