



MEMORIA **BIFI** 2017

MEMORIA **BIFI** **2017**

Presentación

El IUI BIFI constituye un entorno científico singular donde biólogos celulares, biofísicos, físicos y expertos en computación investigamos sistemas complejos, como los seres vivos. Los investigadores del BIFI combinamos teoría, simulación y experimentación, y disfrutamos de una amplia red de colaboraciones con prestigiosos grupos e instituciones internacionales.

Nuestros objetivos son realizar investigación excelente, transferir eficazmente el conocimiento generado, formar nuevos investigadores multidisciplinares y difundir en la sociedad el valor de la Ciencia.

Durante el año 2017 hemos puesto en marcha la primera edición del Máster en Biotecnología Cuantitativa de la Universidad de Zaragoza y hemos mejorado de forma relevante los indicadores de calidad de la producción científica del instituto.

En esta memoria presentamos un resumen de nuestras principales actividades.

Javier Sancho
Director IUI BIFI

INDICE

1. ESTRUCTURA ORGANIZATIVA Y RECURSOS HUMANOS DEL BIFI	7
1.1. ÓRGANOS DE GOBIERNO DEL BIFI	7
1.2. RECURSOS HUMANOS DEL BIFI	8
1.2.1. <i>Personal Universidad de Zaragoza y adscrito</i>	8
1.2.2. <i>Identificación y entidad a la que están vinculados los miembros ordinarios propios adscritos</i>	10
1.2.3. <i>Otros miembros</i>	11
1.2.4. <i>Captación de recursos: incorporación de investigador/personal técnico de laboratorio que ha captado el IUI durante el año 2017</i>	11
1.2.5. <i>Bajas y motivo</i>	11
2. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN DEL BIFI. DISTRIBUCIÓN DEL BIFI EN ÁREAS DE INVESTIGACIÓN	13
2.1. ÁREAS Y LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN DEL BIFI	14
2.1.1. <i>Área de Bioquímica y Biología Molecular y Celular</i>	14
2.1.1.1. Apoptosis y Metabolismo	15
2.1.1.2. Regulación Génica y Fisiología de Cianobacterias	16
2.1.1.3. Microcistinas y su Tecnología	17
2.1.1.4. Biología Evolutiva y Genómica Comparada de Plantas	18
2.1.1.5. Desarrollo de Antimicrobianos y Mecanismos de Resistencia	19
2.1.1.6. <i>Mycobacterium tuberculosis</i>	20
2.1.1.7. Biogénesis y Patología del Sistema OXPHOS	21
2.1.1.8. Genética y Metabolismo del cerdo	22
2.1.2. <i>Área de Biofísica</i>	23
2.1.2.1. Plegamiento de Proteínas y Diseño Molecular	24
2.1.2.2. Flavoenzimas: Mecanismos de Acción y Biotecnología	25
2.1.2.3. Glicosiltransferasas e Hidrolasas Implicadas en Enfermedades Humanas	26
2.1.2.4. Vehiculización de Fármacos	27
2.1.2.5. Interacciones Biomoleculares	28
2.1.2.6. Mal-plegamiento de Proteínas y Agregación Amiloide	29
2.1.3. <i>Área de Física</i>	30
2.1.3.1. Vidrios de Spín	31
2.1.3.2. Modelos Físicos de Biomoléculas	32
2.1.3.3. Sistemas Complejos y Redes	33
2.1.3.4. Dinámica Molecular y Estructura Electrónica	34
2.1.4. <i>Área de Computación</i>	35
2.1.4.1. Computación de Altas Prestaciones	36
2.1.4.2. Computación Grid&Cloud	37
2.1.4.3. Ciencia Ciudadana	38
2.1.4.4. Ordenadores dedicados	39
2.1.4.5. Analítica de Datos, Visualización Avanzada y Transferencia Tecnológica	40
2.2. INFRAESTRUCTURAS DEL BIFI	41
2.2.1. <i>Infraestructuras de Física y Computación</i>	41
2.2.2. <i>Infraestructuras Bioquímica y Biofísica</i>	43
3. ESTRUCTURA DE FINANCIACIÓN: CAPTACIÓN DE RECURSOS Y DESTINO DE LOS MISMOS	45
3.1. FINANCIACIÓN BASAL PROPORCIONADA POR EL GOBIERNO DE ARAGÓN	46
3.2. FINANCIACIÓN PROPORCIONADA POR LAS NÓMINAS DE LA UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA	46
3.3. FINANCIACIÓN PROPORCIONADA POR LAS NÓMINAS DE ARAID, IACS Y CUD	46
3.4. FINANCIACIÓN OBTENIDA EN CONVOCATORIAS DE CARÁCTER PÚBLICO Y CONCURRENCIA COMPETITIVA: EUROPEOS, NACIONALES Y AUTONÓMICOS, OTROS Y PROYECTOS CON EMPRESAS Y OTRAS ENTIDADES	46
3.4.1. <i>Proyectos de carácter europeo</i>	47
3.4.2. <i>Proyectos de carácter nacional</i>	47
3.4.3. <i>Proyectos de carácter autonómico</i>	48
3.4.4. <i>Proyectos de la UZ y otras fuentes de financiación</i>	48
3.5. ESTRUCTURA DE GASTOS E INGRESOS DURANTE EL AÑO 2017	50

4. ACTIVIDAD CIENTÍFICA, INNOVADORA Y TECNOLÓGICA.....	53
4.1. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN.....	53
4.1.1. <i>Proyectos de investigación de financiación pública y de concurrencia competitiva.....</i>	<i>53</i>
4.1.1.1. Proyectos financiados por entidades europeas	53
4.1.1.2. Proyectos financiados por entidades nacionales	54
4.1.1.3. Proyectos financiados por entidades autonómicas.....	57
4.1.1.4. Proyectos/ayudas cofinanciados por la Universidad de Zaragoza y otras entidades	58
4.1.2. <i>Proyectos participados o liderados por investigadores del BIFI financiados por empresas</i>	<i>59</i>
4.2. PUBLICACIONES.....	60
4.3. COMUNICACIONES A CONGRESOS	61
4.4. CONGRESOS, CONFERENCIAS, CURSOS Y JORNADAS ORGANIZADOS POR EL BIFI Y ORGANIZACIÓN DE CONFERENCIAS EN LAS QUE PARTICIPAN INVESTIGADORES DE OTROS CENTROS DE INVESTIGACIÓN	61
4.5. PATENTES	62
4.6. EMPRESAS SPIN-OFF	63
5. FORMACIÓN.....	65
5.1. TESIS DIRIGIDAS LEÍDAS, TRABAJOS FIN DE GRADO, TRABAJOS FIN DE MÁSTER Y TRABAJOS ACADÉMICAMENTE DIRIGIDOS EN 2017	65
5.2. BECAS DE INICIACIÓN A LA INVESTIGACIÓN	69
5.3. CURSOS IMPARTIDOS.....	69
5.4. MÁSTER DE BIOTECNOLOGÍA CUANTITATIVA	70
6. PROYECCIÓN INTERNACIONAL.....	71
6.1. COLABORACIONES EXTERNAS	71
6.1.1. <i>Con centros extranjeros.....</i>	<i>71</i>
6.1.2. <i>Con centros españoles.....</i>	<i>71</i>
6.2. ESTANCIAS EN OTROS CENTROS DE INVESTIGACIÓN	72
7. INTERACCIÓN CON LA SOCIEDAD	73
ANEXOS.....	81
ANEXO 1. PUBLICACIONES EN REVISTAS CIENTÍFICAS	83
ANEXO 2. PARTICIPACIÓN EN CONFERENCIAS, COMUNICACIONES A CONGRESOS ORALES Y POSTERS.....	93
ANEXO 3. CONGRESOS, CONFERENCIAS, CURSOS Y JORNADAS ORGANIZADOS POR EL BIFI Y ORGANIZACIÓN DE CONFERENCIAS EN LAS QUE PARTICIPAN INVESTIGADORES DE OTROS CENTROS DE INVESTIGACIÓN.....	105
ANEXO 4. CENTROS DE INVESTIGACIÓN COLABORADORES CON BIFI.....	107
ANEXO 5. ESTANCIAS DE INVESTIGACIÓN	113

1. Estructura organizativa y recursos humanos del BIFI

1.1. Órganos de Gobierno del BIFI

El Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) de la Universidad de Zaragoza se creó en 2002 e inauguró sus instalaciones en el edificio de I+D ubicado en el Campus Río en 2010.

El BIFI nació impulsado por físicos y bioquímicos de la Universidad de Zaragoza con el propósito de estudiar los sistemas complejos, singularmente los de interés biológico, combinando teoría, simulación y experimentación. De este objetivo principal han derivado de forma natural otros objetivos íntimamente relacionados, tales como transferir el conocimiento generado, formar investigadores multidisciplinares y difundir el valor social de la Ciencia.

Los órganos de gestión del BIFI son el Consejo del Instituto, el Equipo de Dirección y el Equipo de Gobierno. El equipo de Dirección es el siguiente:

Director: Javier Sancho, Catedrático de Bioquímica y Biología Molecular

Subdirector: Yamir Moreno, Profesor Contratado Doctor en Física Teórica

Profesora Secretaria: Marta Martínez-Júlvez, Profesora Titular de Bioquímica y Biología Molecular

El Equipo de Gobierno engloba al Equipo de Dirección, a los responsables de las cuatro Áreas de Investigación del Instituto: Bioquímica (B), Biofísica (Bf), Física (F) y Computación (C), y a los responsables de las infraestructuras, la actividad institucional y los servicios generales del Instituto.



El Consejo del BIFI, cuya composición viene establecida por el Reglamento del Instituto, se reúne anualmente coincidiendo con el Congreso Científico de febrero y debate y aprueba la Memoria Anual y los presupuestos del Instituto. Cada 4 años, realiza, además, la elección del nuevo Director.

1.2. Recursos Humanos del BIFI

Según el Reglamento, los miembros del BIFI pertenecen a alguna de las siguientes categorías:

- **Miembros ordinarios propios (PDI y PI):** Personal docente y/o personal investigador de la Universidad de Zaragoza con dedicación total o parcial al Instituto.
- **Miembros ordinarios adscritos (OA):** Personal contratado por otras entidades con las que el Instituto mantiene convenios oficiales (en la actualidad son la Fundación ARAID y el IACS) y que desempeñan su trabajo en el BIFI.
- **Miembros propios en formación (PFOR):** Personal investigador en formación, de la Universidad de Zaragoza, con dedicación total o parcial al Instituto.
- **Personal de administración y servicios (PAS):** Funcionarios de la Universidad de Zaragoza o personal contratado para tareas de administración, servicios o de apoyo a la investigación que desempeñan su trabajo en el Instituto.
- **Miembros ordinarios pre-estatutarios (OPRE):** Doctores de la Universidad de Zaragoza o de otras instituciones que adquirieron la condición de miembros en la fundación del Instituto o antes de la publicación del reglamento marco de los Institutos de Investigación de la Universidad de Zaragoza (19/10/2005). Algunos de los pertenecientes a este grupo de miembros son también miembros ordinarios adscritos, ya que pertenecen al BIFI desde la fecha indicada.
- **Miembros asociados (ASOC):** Doctores, investigadores y personal investigador en formación pertenecientes a otras universidades o centros de investigación españoles o extranjeros.

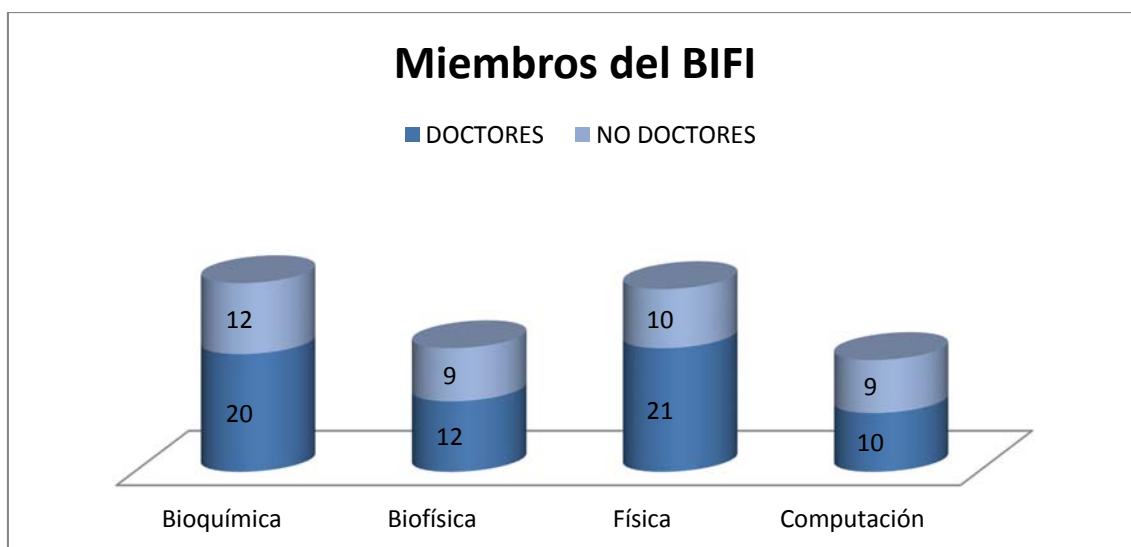
1.2.1. Personal Universidad de Zaragoza y adscrito

En 2017, el personal del BIFI en la Universidad de Zaragoza está formado por 105 personas. De ellas, 97 pertenecen propiamente a la Universidad, 5 a la fundación ARAID, 1 al IACS y 1 al CUD. De los 105 miembros, 91 son investigadores y 14 PAS. De los 14 miembros del PAS, solo 1 es aportado directamente por la Universidad de Zaragoza.

Como se ha indicado, pertenecen también al BIFI miembros de otras categorías (miembros preestatutarios y asociados) cuya actividad NO se recoge en esta memoria.

	AREA	DOCTORES	NO DOCTORES	TOTAL MIEMBROS
PDI. Miembros ordinarios propios (OP)	B	16	0	16
	Bf	7	0	8
	F	20	0	21
	C	6	0	6
		51	0	51
PI	B	1	0	1
	Bf	2	0	2
	F	0	0	0
	C	1	0	1
		4	0	4
Investigadores ordinarios propios adscritos (OA)	B	2	0	2
	Bf	2	0	2
	F	1	0	1
	C	2	0	2
		7	0	7
Investigadores en formación (PFOR)	B	0	11	11
	Bf	0	9	9
	F	0	10	10
	C	0	1	1
		0	31	31
PAS	B	1	1	2
	Bf	1	0	1
	F	0	0	0
	C	1	8	9
	Admin	0	2	2
		3	11	14
Total miembros sin asociados		63	42	105

La distribución de los miembros del BIFI en las cuatro Áreas de Investigación se puede ver en la siguiente gráfica:



Los miembros del BIFI que pertenecen a la Universidad de Zaragoza, así como los 7 miembros adscritos que ejercen habitualmente su actividad en el Instituto, se enumeran a continuación:

Abian Franco, Olga Maria	Fillat Castejon, Maria F.	Moreno Loshuertos, Raquel
Aínsa Claver, José Antonio	Floria Peralta, Luis Mario	Moreno Vega, Yamir
Aleta Casas, Alberto	Galano Frutos, Juan José	Munarriz Tabuenca, Julen
Almudí Higuera, Isabel	García Cebollada, Hector	Ortega Alarcón, David
Alonso Buj, Jose Luis	Garcia Esteve, Jose Vicente	Payrato Borrás, Claudia
Anoz Carbonell, Ernesto	Garrido Perez, Nuria	Peleato Sanchez, M ^a Luisa
Antoli Oca, Beatriz	Giménez Nadal, José Ignacio	Pérez Collazos, Ernesto
Arregui Remón, Sergio	Gimeno Yañez, Carlos	Pérez Gavero, Sergio
Arruebo Muñoz, María	Gomez Gardeñes, Jesus	Plo Alastrue, Blas Fernando
Bayona Bafaluy, Maria Pilar	González Rodríguez, Andrés	Polo Ortiz, Victoriano
Benavides Riveros, Carlos Leonardo	Gonzalo Asensio, Jesús	Ramón García, Santiago
Bergues Pupo, Ana Lisa	Goñi Rasia, Guillermina	Rivero Gracia, Alejandro
Bes Fustero, Maria Teresa	Gopar Sánchez, Víctor Arturo	Rodríguez Cárdenas, Ángela
Bruscolini, Pierpaolo	Gracia Bondia, Jose M.	Romero Tamayo, Silvia
Budagosky Marcilla, Jorge Alejandro	Gracia Lazaro, Carlos	Ruiz Manzanares, Gonzalo
Calvo Sein Echaluze, Violeta	Hernández De Mesa, Sergio	Salillas Berges, Sandra
Carmona Martinez, Jose Manuel	Hernandez Ruiz, Cristina	Sancho Cohen, Rubén
Carrodegua Villar, José Alberto	Hurtado Guerrero, Ramon	Sancho Sanz, Javier
Castro Barrigón, Alberto	Iñiguez Dieste, David	Santos Marco, Patricia
Castro López, Jorge	Jover Galtier, Jorge Alberto	Sanz Saiz, Gerardo
Catalán Rodríguez, María Pilar	Latorre Muro, Pedro	Sarasa Buisán, Cristina
Cauhe Martin, Elisa	Lopez Buesa, Pascual Luis	Sebastian Valverde, Maria
Clavería Gimeno, Rafael	Lopez Lorente, Francisco Javier	Serrano Sanz, Fermin
Clemente Gallardo, Jesus Jeronimo	Losilla Anadon, Guillermo	Sevilla Miguel, Emma
Conde Giménez, María	Maciel Cardoso, Felipe	Tapia Rojo, Rafael
Cremades Casasin, Nunilo	Mahía Moros, Alejandro José	Tarancon Lafita, Alfonso
Cruz Flor, Andres	Marqués, Isabel	Valero González, Jessika
De Las Rivas Gonzalez De Garay,	Martinez Julvez, Marta Maria	Valles Perez, Ruben
Matilde	Mateo Collazos, Pedro	Vega Sánchez, Sonia
Falceto Bleuca, Fernando	Meade Huerta, Patricia	Velázquez Campoy, Adrián
Falo Fornies, Fernando	Medina Trullenque, Milagros	Vergara Larrayad, Yolanda
Fernandez Silva, Patricio	Meloni, Sandro	Vidal Úrbez, Isabel
Fernandez-Pacheco Perez, Amalio	Merino, Pedro	Villanueva Llop, Raquel
Ferreira Neila, Patricia	Molina Chueca, José Alberto	Viruel Sanchez, Juan
Ferrer Marco, Alfredo	Moreno Gordo, Javier	

1.2.2. Identificación y entidad a la que están vinculados los miembros ordinarios propios adscritos

Como se ha indicado, el BIFI tiene 7 miembros adscritos, plenamente incorporados a las tareas del Instituto. Son los siguientes:

Investigadores del Programa ARAID:

Ramón Hurtado Guerrero
 David Iñiguez Dieste
 Adrián Velázquez Campoy
 Alberto Castro Barrigón
 Santiago Ramón García

Investigadora del IACS:

Olga Abián Franco

Investigador del CUD:

Sergio Pérez Gavero

1.2.3. Otros miembros

Por otra parte, hay 44 miembros doctores y 3 no doctores (13 pre-estatutarios y 34 asociados) que son miembros del BIFI pero pertenecen a otros centros de investigación nacionales o internacionales.

Aunque estos 44 miembros externos realizan una importante contribución a la vida científica y al reconocimiento del Instituto, los datos que reflejan su actividad investigadora y su captación de recursos NO se reflejan en esta memoria, como ya se ha explicado. La memoria se centra en describir exclusivamente la actividad de los 105 miembros que desarrollan su actividad en la Universidad de Zaragoza.

1.2.4. Captación de recursos: incorporación de investigador/personal técnico de laboratorio que ha captado el IUI durante el año 2017

Durante este año 2017, se han incorporado al BIFI un investigador profesor titular, un investigador Araid y un catedrático además de 9 estudiantes predoctorales.

En 2017 se han contratado a dos técnicos de apoyo a la investigación para el funcionamiento de las infraestructuras: el Laboratorio de Cribado y el Laboratorio de Supercomputación.

Se puede mencionar también que en este año han defendido 10 tesis doctorales, han realizado su trabajo fin de máster 8 estudiantes y su proyecto fin de grado otros 34 estudiantes.

1.2.5. Bajas y motivo

Durante el año 2017 en el BIFI ha habido 3 bajas.

- Olga Varea cursa baja por finalización de vínculo contractual.
- Alejandra Nelo cursa baja por finalización de vínculo contractual.
- Ricardo Lopez Ruiz por petición propia.

2. Líneas de investigación del BIFI. Distribución del BIFI en Áreas de investigación

El BIFI articula a sus miembros de la Universidad de Zaragoza en 4 áreas (Bioquímica, Biofísica, Física y Computación) que engloban a 23 líneas de investigación.

En 2017, la estructura científica del BIFI en áreas se ha mantenido, sólo se ha suprimido una de las líneas del área de Física.



Los miembros del BIFI forman parte de 14 Grupos de Investigación Consolidados reconocidos por el Gobierno de Aragón (GA).

Área	Ref	Nombre del Grupo
Exp y Mat	E24/3	Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
Exp y Mat	E19	Física Estadística y No Lineal
Biomédicas	B18	Biología Estructural
Biomédicas	B89	Protein Targets
Biomédicas	B01	Patología Digestiva
Biomédicas	B25	Genética de Micobacterias
Exp y Mat s	E24/2	Grupo Teórico de Altas Energías
Exp y Mat	E24/1	Física Matemática y Teoría de Campos
Exp y Mat	E22	Modelos Estocásticos
Exp y Mat	E07	Catálisis Homogénea por Compuestos Organometálicos
Ag y Vet	A52	Bioflora
Ag y Vet	A51	Tecnología y Genética Porcina
Sociales	S13	Economía Familiar e Industrial
Biomédicas	B33	Biogénesis y Patología Mitocondrial

Los objetivos y logros principales en 2017 de las 4 Áreas y sus 23 líneas de investigación se describen a continuación.

2.1. Áreas y líneas de investigación del BIFI

2.1.1. Área de Bioquímica y Biología Molecular y Celular

Objetivo del área. Comprender y controlar sistemas biológicos que dependen de proteínas con interés para aplicaciones en los campos de la Química, Biotecnología, Farmacología y Biomedicina.

Responsable de Área: José Alberto Carrodegua.

Lineas de Investigación:

Lineas	Responsables
Apoptosis y metabolismo	IP. José Alberto Carrodegua
Regulación génica y fisiología de cianobacterias	IP. María Fillat
Microcistinas y su tecnología	IP. María Luisa Peleato
Biología evolutiva y genómica comparada de plantas	IP. Pilar Catalán
Desarrollo de antimicrobianos/mecanismos de resistencia	IP. José Antonio Aínsa
<i>Mycobacterium tuberculosis</i>	IP. Jesús González-Asensio
Biogénesis y patología del sistema OXPHOS	IP. Patricio Fernández/ Pilar Bayona
Genética y metabolismo del cerdo	IP. Pascual López Buesa



2.1.1.1 Apoptosis y Metabolismo

Investigador Principal: José Alberto Carrodegua.

Objetivo y descripción. Estudiar proteínas implicadas en apoptosis y regulación del metabolismo desde el punto de vista funcional y de su implicación en patologías.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
José A. Carrodegua / Prof. Contratado Dr. Investigador	B89-Grupo Protein Targets
Investigadores implicados Pedro Latorre Muro. Contratado predoctoral	A51-Tecnología y Genética porcina

Logros en 2017

- Se ha concluido y publicado un estudio sobre el papel de la glicosilación de Pgc1 alfa en el control de la expresión de la fosfoenolpiruvato carboxikinasa citosólica, en colaboración con el Dr. Pascual López Buesa.
- Se ha enviado a publicar a la revista Molecular Cell, y ha sido revisado con expectativas de ser publicado, un trabajo sobre el papel de la acetilación y la fosforilación en la regulación de la actividad de la fosfoenolpiruvato carboxikinasa, en colaboración con el Dr. John Denu en Madison, USA. Estos resultados se han presentado en el FEBS 3 + XL SEBBM Congress celebrado en Barcelona.
- Se ha concluido y está pendiente de defensa la Tesis Doctoral de Pedro Latorre Muro, titulada "Mecanismos moleculares de regulación de la actividad de la fosfoenolpiruvato carboxikinasa citosólica (Pck1) y su aplicación al metabolismo lipídico en el cerdo."
- Se ha inactivado la fosfoenolpiruvato carboxikinasa citosólica en células humanas mediante la técnica de CRISPR (TFG de Alba Beltrán).
- Se ha inactivado la fosfoenolpiruvato carboxikinasa mitocondrial en células humanas mediante la técnica de CRISPR (TFG de Guayente Latorre).
- Se ha comenzado el estudio de AIFM3, un factor inductor de apoptosis asociado a la mitocondria (TFG de Nerea Novo).
- Se ha sintetizado, analizado químicamente y estudiado en células en cultivo un posible compuesto antitumoral (TFG de Isabel Bascuas).
- Se ha participado en una solicitud de un proyecto Retos Colaboración-Empresa liderado por el Dr. Rafael Pagán, del Dpto. de Producción Animal y Ciencia y Tecnología de los Alimentos de la Facultad de Veterinaria de la Universidad de Zaragoza enfocado a la producción de derivados lácteos con baja cantidad de histamina medición edición genómica en bacterias.
- Se ha obtenido el Premio Coris Gruart en la modalidad de Zootecnia, Producción Animal y Ciencia y Tecnología de los Alimentos de origen animal, así como Ciencias Básicas relacionadas con las mismas, por un trabajo realizado en colaboración con el Dr. Pascual López Buesa.

2.1.1.2 Regulación Génica y Fisiología de Cianobacterias

Investigadora Principal: María Fillat.

Objetivo y descripción. Estudio funcional de proteínas FUR (ferric uptake regulator) en cianobacterias y patógenos de interés.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
María F. Fillat Castejón/Catedrático (CU)	B18-Biología Estructural
Investigadores implicados Teresa Bes Fustero/Profesor Titular (TU) Emma Sevilla Miguel/profesora Asociada Violeta Calvo Sein-Echaluce/Contratado DGA Andrés Sandoval Cristina Sarasa Buisán/Estudiante de Máster	B18-Biología Estructural B18 Biología Estructural B18 Biología Estructural B18 Biología Estructural -

Logros en 2017

- Se ha estudiado el mecanismo de actuación del regulador FurB (Zur) de *Anabaena* y se ha determinado la interacción de esta proteína con su cofactor. FurB contiene un átomo de zinc de carácter estructural por molécula y dos sitios de unión de zinc regulador. Ambos sitios se ocupan por el metal únicamente en condiciones reductoras y es cuando la interacción con el DNA diana es óptima. Estos resultados demuestran por vez primera que la actividad de una proteína Zur está modulada por el estado redox del entorno. La comparación de la secuencia de FurB con las de otros ortólogos cristalizados indica que el zinc estructural está coordinado por las 4 cisteínas presentes en los motivos CXXC de la estructura primaria.
- Se ha identificado que la cisteína C93 está implicada en la unión del segundo átomo de zinc regulador que únicamente tiene lugar en condiciones reductoras. Por otra parte, se han identificado nuevos inhibidores del regulador Fur de *Pseudomonas aeruginosa*.
- Se ha obtenido el regulador Fur de *C. difficile* y se ha realizado su caracterización funcional, describiendo por primera vez un papel dual para esta proteína como modulador de la homeostasis de hierro y sensor redox Fur. Dado que mutantes de delección de Fur de *C. difficile* presentan virulencia atenuada, se ha propuesto que Fur puede ser una excelente diana terapéutica, si se desestabiliza la homeostasis redox y/o de hierro del patógeno. Se han identificado tres compuestos que interaccionan con FurCd, de los cuales dos afectan a su actividad como regulador transcripcional.

2.1.1.3 Microcistinas y su Tecnología

Investigadora Principal: María Luisa Peleato.

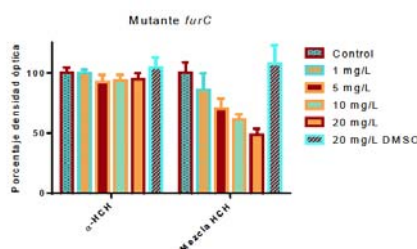
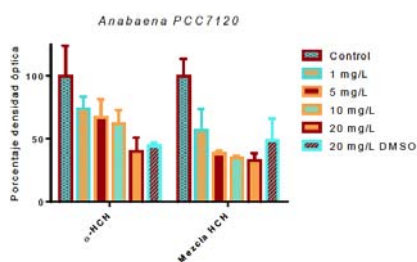
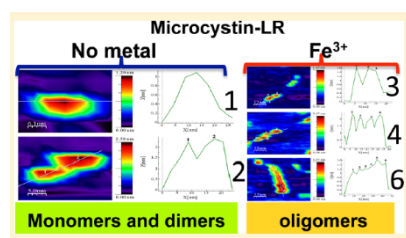
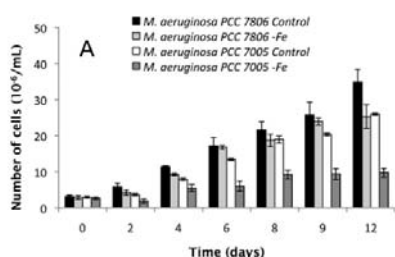
Objetivo y descripción. Desarrollo de aplicaciones prácticas derivadas de los conocimientos sobre las cianobacterias al problema de las aguas contaminadas como consecuencia de los vertederos incontrolados de lindano y sus isómeros. Las enzimas encargadas de la síntesis no ribosomal de microcistina se inducen en presencia de γ -lindano. Este aspecto tiene que ser controlado en el caso de plantear una biorremediación *in situ*.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
María Luisa Peleato Sánchez/ Catedrático (CU)	B18-Biología Estructural
Investigadores implicados Emma Sevilla Miguel/Profesor Ayudante Doctor Cristina Sarasa Buisán/ Estudiante de doctorado Sara Abizanda/ Estudiante de Máster Jorge Guio/ Estudiante de TFG	B18 Biología Estructural -

Logros en 2017

- Se ha estudiado la tolerancia de la cianobacteria *Anabaena* PCC7120 a los distintos isómeros del lindano.
- Se ha caracterizado la respuesta al lindano de una cepa de sobreexpresión del regulador transcripcional FurC en *Anabaena*, mostrando esta una mayor tolerancia al pesticida.
- Se han llevado estudios bioinformáticos sobre los genes que potencialmente podrían estar implicados en la ruta de degradación del lindano en *Anabaena*. Medidas con RT-PCR han permitido evaluar cambios en la expresión como consecuencia de la exposición a lindano y sus isómeros.
- Se ha descrito que la microcistina es capaz de formar oligómeros en presencia de hierro, con implicaciones fisiológicas muy interesantes en cuanto al papel que pueden jugar las microcistinas en el metabolismo del hierro de las cianobacterias tóxicas. La síntesis de toxinas les conferirían una ventaja competitiva en medios escasos de hierro, frecuente en ecosistemas acuáticos.



2.1.1.4 Biología Evolutiva y Genómica Comparada de Plantas

Investigadora Principal: Pilar Catalán.

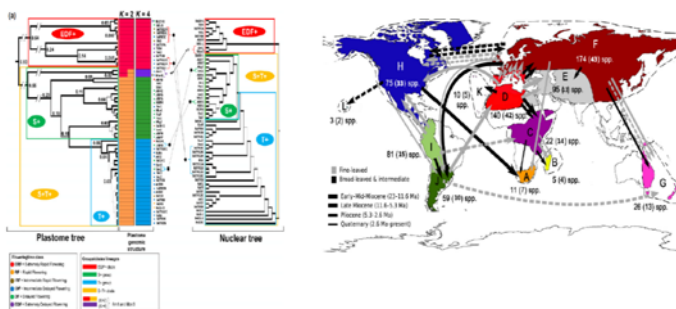
Objetivo y descripción. Desarrollar análisis filogenómicos, filogeográficos, de genómica comparada y de expresión génica en plantas modelo y no-modelo para comprender los procesos biológico-evolutivos causantes de la divergencia y la especiación en las plantas. Transferir estos conocimientos a otras plantas silvestres y a plantas de interés agronómico y biocombustible.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Pilar Catalán Rodríguez/Catedrático (CU)	A52-Bioflora
Investigadores implicados Ernesto Pérez Collazos (CDi) Isabel Marques/Contratada europea Marie Curie Rubén Sancho Cohen/ Investigador en Formación FPI	A52-Bioflora A52-Bioflora A52-Bioflora

Logros en 2017

- Se ha construido el pangenoma de la planta modelo *Brachypodium distachyon* (54 líneas resecuenciadas) obteniéndose el doble del número de genes que en cualquier línea individual, genes comunes enriquecidos en funciones biológicas esenciales y genes accesorios en funciones condicionalmente beneficiosas, con estos últimos últimos mostrando mayores tasas de mutación, mayor proximidad y expresión modulada por transposones, y menor ortología con genes de otras gramíneas.
- Se han analizado los plastomas de 56 líneas de *B. distachyon*, *B. stacei* y *B. hybridum* y se han comparado con la filogenia nuclear, observándose diferencias estructurales entre los plastomas, y una evolución intraespecífica en *B. distachyon* que separa a los principales linajes por sus tiempos de floración y secundariamente por su geografía, junto con diversos casos de introgresión indicativos de la recurrencia del flujo génico.
- Se han estudiado caracteres fenotípicos y metabolómicos de *B. distachyon*, *B. stacei* y *B. hybridum* que discriminan significativamente a las tres especies, y una asociación significativa del tamaño del grano de polen y de la longitud de la lema con diversos metabolitos.
- Se han analizado poblaciones ibéricas de *B. distachyon* observándose elevadas tasas de homocigosis y de autofertilidad, y una mayor diversidad genética y mejor adaptación ambiental de las poblaciones orientales calcícolas con respecto a las poblaciones occidentales silicícolas, que viven en suelos con mayor toxicidad por ion aluminio.
- Se han estimado las tasas de diversificación y la evolución cromosómica en los principales linajes de gramíneas pooideas, observándose que la radiación de linajes del núcleo pooide coincidió con cambios ambientales en la transición Oligoceno-Mioceno.
- Se ha reconstruido la biogeografía de la subtribu de gramíneas Loliinae, obteniéndose mayores tasas de dispersión en los linajes de hojas anchas que en los de hojas finas, si bien el factor limitante es la distancia entre áreas con hábitats adecuados.



2.1.1.5 Desarrollo de Antimicrobianos y Mecanismos de Resistencia

Investigador Principal: José A. Aínsa Claver.

Co-Investigador Principal: Santiago Ramón García

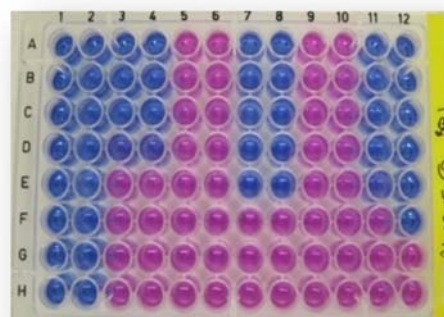
Objetivo y descripción. Desarrollar nuevos antimicrobianos contra patógenos específicos, conocer sus mecanismos de resistencia e iniciar el proceso de su desarrollo.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
José Antonio Aínsa Claver/Profesor Titular (TU) Santiago Ramón-García/Investigador ARAID Investigadores implicados Ainhoa Lucía Quintana/Postdoc Senior Clara Aguilar Pérez/Investigador en Formación FPI Ernesto Anoz Carbonell/Investigador en Formación FPU Lara Muñoz Muñoz/FIR Microbiología (HCU Lozano Blesa) Ana Cristina Millán Placer/Estudiante de Master Begoña Gracia Díaz/Técnico de Laboratorio	B25-Genética de Micobacterias B25-Genética de Micobacterias B25-Genética de Micobacterias B25-Genética de Micobacterias - B25-Genética de Micobacterias B25-Genética de Micobacterias B25-Genética de Micobacterias

Logros en 2017:

- La actividad antituberculosis de la bacteriocina AS-48 se ha verificado en modelo de infección de macrófagos.
- Se han iniciado nuevas líneas de investigación sobre identificación de actividad antimicrobiana y efectos sinérgicos de fármacos frente a bacterias Gram-positivas, Gram-negativos y Micobacterias no tuberculosas
- Se han iniciado nuevas líneas de caracterización del modo de acción de nuevos compuestos con actividad antimicrobiana y anti-tuberculosa.
- Se ha iniciado una colaboración con el Departamento de Química Orgánica para la identificación de nuevas moléculas con actividad anti-microbiana procedentes de una nueva librería química nunca testada en ensayos biológicos.
- Continúa la caracterización de compuestos activos frente a *Streptococcus pneumoniae*, *Mycobacterium tuberculosis* y otras bacterias por inhibición de la síntesis de FAD.
- Se ha avanzado en la caracterización de la actividad de fármacos antituberculosis encapsulados en nanopartículas frente a *Staphylococcus aureus* y *Mycobacterium tuberculosis*.
- Hemos renovado y creado convenios de colaboración con empresas farmacéuticas y Universidades de ámbito internacional.



2.1.1.6 *Mycobacterium tuberculosis*

Investigador Principal: Jesús Gonzalo-Asensio.

Objetivo y descripción. Conocer las estrategias evolutivas de *M. tuberculosis*. Mejora biotecnológica de la vacuna MTBVAC

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Jesús Gonzalo-Asensio (Profesor Ayudante Doctor)	B25-Genética de Micobacterias
Investigadores implicados Carlos Martín Montañés (CU) Esther Broset Blasco (investigadora postdoctoral) Irene Pérez Sánchez (becaria DGA) Juan Calvet Seral (estudiante de Máster) Ana Picó Marco (técnico laboratorio))	B25-Genética de Micobacterias B25-Genética de Micobacterias B25-Genética de Micobacterias B25-Genética de Micobacterias B25-Genética de Micobacterias

Logros en 2017:

- Identificación de antígenos ausentes en la actual vacuna BCG pero presentes en la vacuna MTBVAC. Estudio de su impacto en la capacidad protectora de las vacunas.
- Influencia del fondo genético del hospedador en la respuesta inmune frente a los antígenos indentificados en el punto anterior.
- Estudio de la IS6110 en el *Mycobacterium tuberculosis* Complex. Regulación post-transcripcional mediada por “translational frameshift” y “pseudoknot”. Estudio del contenido en IS6110 en >2000 aislados clínicos y su relación con los diferentes linajes.
- Plataforma para la expresión y secreción de antígenos en la vacuna MTBVAC. Expresión heteróloga de variantes genéticamente inactivas de las toxinas de difteria, tétanos y tosferina. Verificación de la producción de anticuerpos. Estudios de funcionalidad y protección cruzada frente a tuberculosis y tosferina.
- Construcción de vacunas basadas en MTBVAC en los linajes 2 y 3 de *Mycobacterium tuberculosis*. Caracterización de fenotipos dependientes de *phoP* en ambas vacunas.

2.1.1.7 Biogénesis y Patología del Sistema OXPHOS

Investigador Principal: Patricio Fernández/Pilar Bayona.

Objetivo y descripción. Estudio de la biogénesis, organización estructural y fisiopatología del sistema OXPHOS.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Patricio Fernández/ Prof. Titular (TU) Pilar Bayona Bafaluy/ Prof. Contratado Dr Investigadores implicados Nuria Garrido Pérez Patricia Meade Huerta Raquel Moreno Loshuertos	B18-Biología Estructural B33-Biogénesis y Patología Mitocondrial B33- Biogénesis y Patología Mitocondrial B33- Biogénesis y Patología Mitocondrial B18 Biología Estructural

Logros en 2017

- Se han seguido analizando los factores que modulan la organización de los complejos respiratorios para consolidar el modelo de plasticidad.
- Se ha seguido investigando el efecto de la xenoexpresión de AOX en ratones deficientes en complejo IV en músculo esquelético como posible aproximación terapéutica. Los resultados apuntan a que una baja expresión de AOX no resulta suficiente para compensar el defecto de CIV.
- Se ha comenzado a caracterizar a nivel genético y molecular una nueva mutación en el gen AIF encontrada en un paciente con el síndrome de Charcot-Marie-Tooth y se siguen analizando los efectos sobre la función mitocondrial de mutaciones en este factor generadas en una colaboración dentro del grupo de Biología Estructural.
- Se ha completado y publicado el estudio de las modificaciones del sistema de fosforilación oxidativa producidas por el uso del antibiótico linezolid.

2.1.1.8 Genética y Metabolismo del cerdo

Investigador Principal: Pascual López Buesa.

Objetivo y descripción: Análisis de mutaciones en el cerdo, estudio de los efectos de las mutaciones sobre caracteres productivos y sobre la calidad de la carne y de la canal. Búsqueda de mutaciones que afecten al contenido graso y a la calidad de la carne de cerdo y estudio de los mecanismos bioquímicos de las mutaciones.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Pascual López Buesa /Profesor titular	A51-Tecnología y genética porcina
Investigadores implicados José Alberto Carrodegua Villar Carmen Burgos Serrano Pedro Latorre Muro Jorge Hidalgo Gracia	B89-Protein Targets A51-Tecnología y genética porcina A51-Tecnología y genética porcina A51-Tecnología y genética porcina

Logros en 2017

- Se ha descubierto una mutación genética en cerdos que favorece una mayor presencia de grasa intramuscular en la carne de cerdo y que contribuye a la obtención de una carne con mayor grado de jugosidad y sabor. Este hallazgo se recoge en la revista *Scientific Reports* y puede ser relevante para la selección genética de cerdos por lo que ha sido patentado por la Universidad de Zaragoza. Su aplicación para la selección porcina contribuirá a conseguir una mayor calidad del producto por parte del sector industrial de la carne porcina.

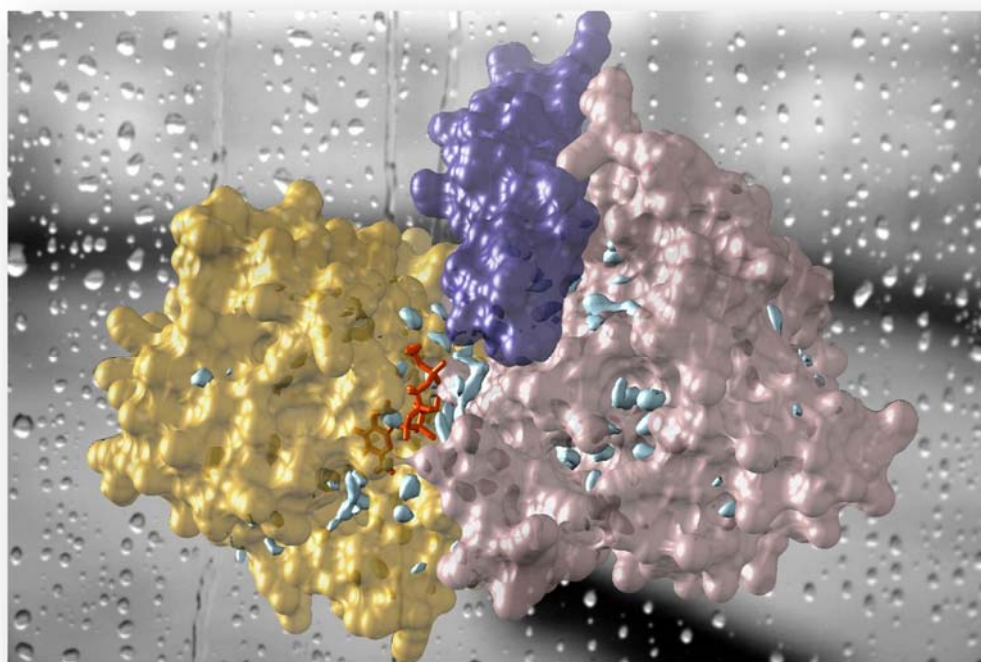
2.1.2. Área de Biofísica

Objetivo: Utilización de herramientas computacionales y experimentales en un entorno multidisciplinar para comprender el comportamiento de sistemas biológicos, desde moléculas biológicas hasta organismos, desde una perspectiva cuantitativa, con aplicación en biología, biotecnología y biomedicina.

Responsable del Área de Biofísica: Ramón Hurtado Guerrero.

Lineas de investigación:

Lineas	Responsables
Plegamiento de proteínas y diseño molecular	IP Javier Sancho
Flavoenzimas:mecanismos de acción y biotecnología	IP Milagros Medina
Glicosiltransferasas/hidrolasas en enfermedades humanas	IP Ramón Hurtado-Guerrero
Vehiculización de fármacos	IP Olga Abián
Interacciones biomoleculares	IP Adrián Velázquez-Campoy
Mal-plegamiento de proteínas y agregación amiloide	IP Nunilo Cremades



2.1.2.1. Plegamiento de Proteínas y Diseño Molecular

Investigador Principal: Javier Sancho.

Objetivo y descripción. Estudiar cómo la secuencia de aminoácidos determina la estructura de las proteínas, su capacidad de reconocer a otras moléculas y sus funciones biológicas.

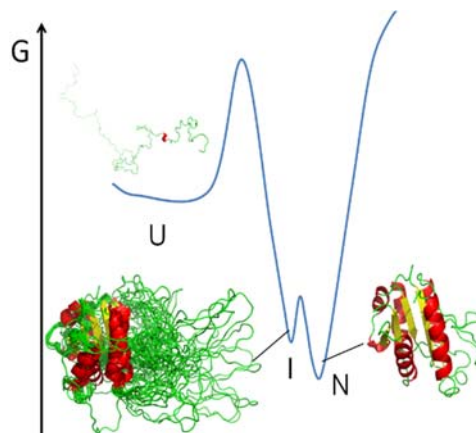
Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Javier Sancho Sanz/ Catedrático (CU)	B89-Protein Targets
Investigadores implicados Juan José Galano/ Investigador Doctor María Conde/ Contratada predoctoral Alejandro Mahía/ Contratado MINECO Sandra Salillas/ Contratada DGA Héctor García/ Contratado MINECO	B89-Protein Targets B89-Protein Targets B89-Protein Targets B89-Protein Targets B89-Protein Targets

Logros en 2017

Se ha evaluado experimentalmente por vez primera la importancia de un intermediario de plegamiento conservado de la cuenca nativa de una proteína en su plegamiento, interacción y función biológica:

- Lamazares et. al.: Direct examination of the relevance for folding, binding and electron transfer of a conserved protein folding intermediate. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2017 19:19021-19031



Se han puesto en marcha los proyectos:

- Estructura, energética y simulación de conformaciones (parcialmente) desplegadas de las proteínas. Hacia modelos atómicos cuantitativos de la estabilidad de las proteínas. MINECO
- Nuevas estrategias personalizadas para combatir enfermedades de origen infeccioso y de origen molecular (Grupo de Acción de Tecnologías para la Salud): CAMPUS IBERUS
- Ningún paciente de fenilcetonuria sin un tratamiento eficaz: FECYT-PRECIPITA (crowdfunding)

Se han patentado nuevos compuestos para el tratamiento de sinucleopatías:

- S. Ventura et al.: Compounds for treating synucleopathies. 17158468.3-1462

Se han leído dos Tesis Doctorales:

- Estabilización racional de la apoflavodoxina de *Anabaena* PCC 7119 y estudio de la relevancia de su intermediario térmico. Emilio Lamazares
- Caracterización bioquímica y estructural de la flavodoxina de *Streptococcus pneumoniae* cepa TIGR4. Ángela Rodríguez

2.1.2.2. Flavoenzimas: Mecanismos de Acción y Biotecnología

Investigadora Principal: Milagros Medina.

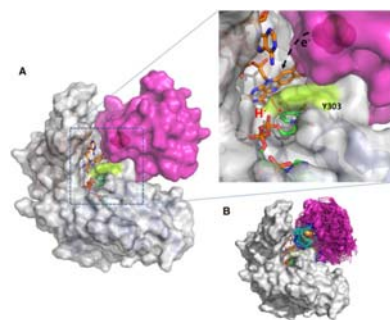
Objetivo y descripción. Potenciar el conocimiento de diversas flavoenzimas para su aplicación biotecnológica y terapéutica.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Milagros Medina Trullenque/Catedrático (CU)	B18-Biología Estructural
Investigadores implicados Marta Martínez Júlvez/Profesor Titular (TU) Patricia Ferreira Neila/Profesor Contratado Doctor (COD) María Sebastián Valverde/Investigador en Formación DGA Ernesto Anoz Carbonell/Investigador en Formación FPU Silvia Romero Tamayo/Investigador en Formación Soraya Hernández Haitibi/Estudiante de Máster Yasmina Coman/Estudiante de Máster Sergio Fernández Ayala/Estudiante de Grado María Marco Clavero/Estudiante de Grado Victor Taleb Seral/Estudiante de Grado Daniel Pérez Amigot/Estudiante de Grado Laura Aguado Álvaro/Estudiante de Grado Nikol Paulina Zeballos Lema/Estudiante de Grado Julio Rodrigo Rodrigo/Estudiante de Grado Mikel Marín Baquero/Estudiante de Grado	B18-Biología Estructural B18-Biología Estructural B18-Biología Estructural B18-Biología Estructural B18 Biología Estructural - - - - - - - - - -

Logros en 2017

- Se ha descrito cómo la dinámica de la aril-alcohol oxidasa (AAO) promueve un mecanismo de “tunnelling” de hidruro durante la oxidación de sustratos, y se ha iniciado el proceso de patente del uso de AAO en una cascada enzimática para la producción de bioplásticos a partir de furfural derivados.
- En la línea de oxidoreductasas de planta hemos caracterizado i) una proteína tipo ferredoxin-NADP⁺ reductasa (FNR-like) de *Arabidopsis* con propiedades de FNR bacteriana; y ii) revisado los aspectos estructurales, funcionales y fisiológicos que determinan los procesos de interacción y transferencia de electrones en FNRs plastídicas.
- En el tema de la FAD sintetasa bacteriana hemos descrito: i) propiedades diferenciales para la enzima del patógeno *Streptococcus pneumoniae* respecto de otras especies, avalando su potencial como diana en la búsqueda de nuevos antimicrobianos especie específicos; y en la enzima de *C. ammoniagenes* ii) aspectos estructurales para la formación del complejo riboflavina quinasa catalíticamente competente, así como iii) el papel de ciertos residuos en su oligomerización durante la catálisis.
- Respecto al Factor de Inducción de Apoptosis humano estamos analizando la relevancia funcional y patológica del mecanismo molecular de su actividad oxidasa.



2.1.2.3. Glicosiltransferasas e Hidrolasas Implicadas en Enfermedades Humanas

Investigador Principal: Ramón Hurtado-Guerrero.

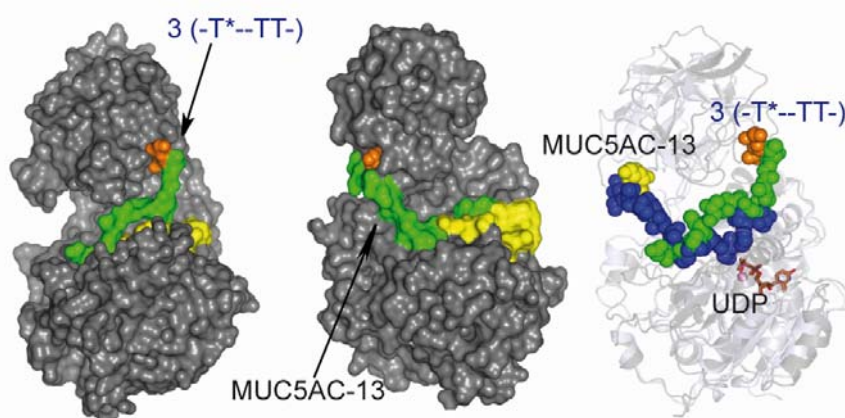
Objetivo y descripción. Esta línea de investigación se centra en el estudio enzimas/proteínas que procesan carbohidratos.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Ramón Hurtado-Guerrero/Investigador ARAID	B89-Protein Targets
Investigadores implicados Jorge Castro/Contratado predoctoral Matilde de las Rivas/ Contratado predoctoral Ana García García/ Contratado predoctoral Andrés González Ramírez/Contratado predoctoral	B89-Protein Targets B89-Protein Targets B89-Protein Targets B89-Protein Targets

Logros en 2017

- Se ha elucidado el mecanismo molecular de cómo las GalNAc-Ts presentan diferentes preferencias de glicosilación de larga distancia. Este mecanismo se basa en la diferente orientación del dominio de lectina entre estas enzimas con respecto al dominio catalítico, y explica el por qué unas de estas enzimas glicosilan sitios aceptores en el N-terminal y otras en el C-terminal de glicopéptidos que están previamente glicosilados en el C- y en el N-terminal, respectivamente (publicado en Nature Communications).
- Se ha determinado también las bases moleculares de la interacción entre el anticuerpo SM3, el cual reconoce el antígeno Tn en humanos, y un nuevo péptido modificado derivado del antígeno Tn y que contiene un átomo de flúor en un residuo de prolina. Además hemos demostrado que estos nuevos péptidos sintéticos son mejores herramientas para el diagnóstico del cáncer de próstata (publicado en JACS). Es importante mencionar que el antígeno Tn se encuentra en células cancerígenas y no en células sanas.



2.1.2.4. Vehiculización de Fármacos

Investigador Principal: Olga Abián.

Objetivos y descripción. Desarrollar nuevas estrategias de vehiculización de algunos compuestos antivirales activos contra el virus de hepatitis C (VHC). Desarrollar nuevos métodos de diagnóstico en plasma sanguíneo de enfermedades tumorales basados en la calorimetría diferencial de barrido.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación del Grupo GA
Olga Abián Franco/ Investigadora Senior del Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud (IACS)	B1-Patología Digestiva
Investigadores implicados Rafael Clavería/ Contratado Predoctoral DGA María Arruebo/ Contratado Predoctoral ISCIII Alberto Rodrigo /Residente Oncología Judith Millastre/Adjunta Digestivo	B1-Patología Digestiva B1-Patología Digestiva - B1-Patología Digestiva

Logros en 2017

- Se ha defendido una tesis doctoral en el grupo: Rafael Clavería en el programa de doctorado de Bioquímica y Biología Molecular de la Universidad de Zaragoza, titulada: *"Biophysical characterization and identification of bioactive compounds against the pharmacological target MeCP2 and evaluation of drug nanocarriers"* 27 Noviembre 2017 Sobresaliente Cum Laude (con mención de doctorado internacional).
- Se han validado en cultivo celular la actividad y citotoxicidad de fármacos antivirales que han sido vehiculizados mediante diferentes métodos utilizando estructuras poliméricas.
- Se ha continuado con el trabajo para desarrollar el proyecto FIS financiado por el Instituto de Salud Carlos III 2017-2018 "Análisis de las interacciones proteínas/metabolitos en plasma mediante calorimetría: aplicación como método diagnóstico rápido y no invasivo para detección precoz y seguimiento de patologías tumorales digestivas (DIGCal)".

2.1.2.5. Interacciones Biomoleculares

Investigador Principal: Adrián Velázquez Campoy.

Objetivo y descripción: Estudiar la función (interacciones y cambios conformacionales) en proteínas de interés biomédico y biotecnológico. Diseñar e implementar metodologías de cribado molecular experimental para identificar compuestos capaces de modular la función de proteínas diana.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Adrián Velázquez Campoy/Investigador ARAID	B89-Protein Targets
Investigadores implicados	
José Luis Neira Faleiro/ Catedrático	-
Universidad Miguel Hernández (Elche)	-
Rafael Clavería Gimeno/ Contratado	B01-Patología Digestiva
Predoctoral	-
David Ortega Alarcón/Investigador Contratado	

Logros en 2017

- Determinación de parámetros de cooperatividad de unión de cofactor FAD en NQO1 proteína asociada a cáncer y quimioresistencia.
- Identificación de un compuesto que actúa bloqueando la proteína NUPR1, como potencial fármaco para el tratamiento de adenocarcinoma pancreático.
- Estudio de la interacción de metales con microcistina, toxina de cianobacterias que provoca alteraciones gastrointestinales, reacciones alérgicas o irritación.
- Evaluación de la influencia de regiones desestructuradas sobre la estabilidad y las interacciones del dominio de unión a DNA de la proteína MeCP2, involucrada en Síndrome de Rett

2.1.2.6. Mal-plegamiento de Proteínas y Agregación Amiloide

Investigador Principal: Nunilo Cremades.

Objetivo y descripción. Más de 50 enfermedades humanas, entre ellas la enfermedad de Alzheimer, de Parkinson o la diabetes mellitus tipo 2, tienen como característica común el mal-plegamiento y posterior agregación de una proteína o péptido concreto en forma de fibras amiloides que se acumulan causando enfermedad. Esta línea de investigación se centra en comprender los mecanismos de la agregación y la toxicidad asociada en el desarrollo y progresión de enfermedad y en identificar nuevas dianas proteicas para el desarrollo de herramientas de diagnóstico precoz y de tratamientos más efectivos para este tipo de enfermedades.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo DGA
Nunilo Cremades/Investigador Ramón y Cajal	B89-Protein Targets
Investigadores implicados Marta Castellana Cruz/ Contratado Predoctoral Universidad de Cambridge (UK) Jose Daniel Camino Camino/ Contratado Predoctoral Pablo Gracia González/ Contratado Predoctoral	- B89-Protein Targets B89-Protein Targets

Logros en 2017

- Se ha avanzado en la comprensión de la agregación amiloide de la proteína alfa-sinucleína y los mecanismos de toxicidad asociada.
- Se ha determinado uno de los mecanismos por los que la chaperona Hsp70 humana inhibe la agregación amiloide de forma específica y eficiente.
- Se han publicado 3 artículos científicos en revistas científicas prestigiosas: Science, Proc. Natl. Acad. Sci. USA y Biochemistry, que han sido el resultado de sendas colaboraciones internacionales.
- Se ha publicado un artículo de revisión en Int. Rev. Cell. Mol. Biol,
- Se han establecido colaboraciones internacionales adicionales abordando proyectos de investigación nuevos.

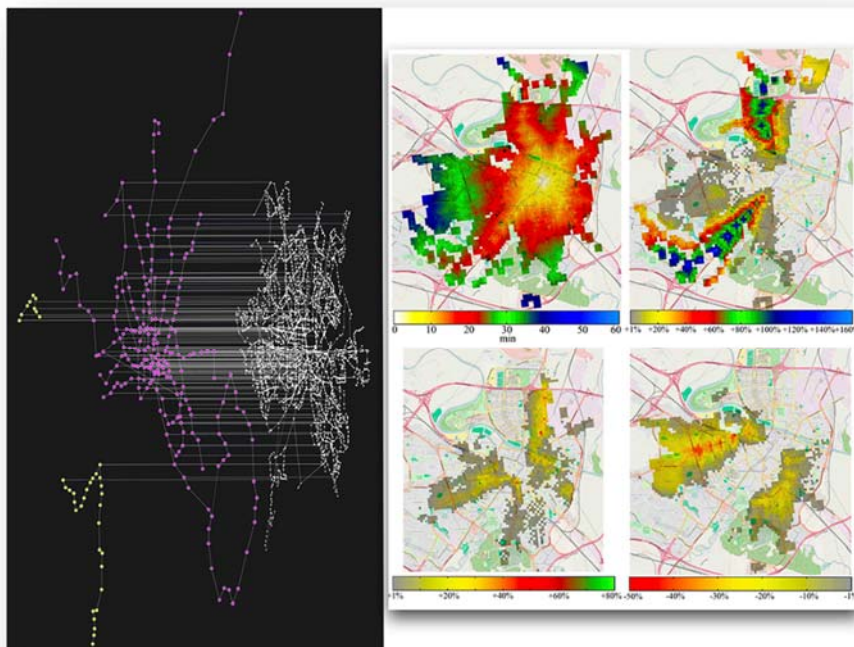
2.1.3. Área de Física

Objetivo: la investigación en Física llevada a cabo en el BIFI tiene un marcado carácter transdisciplinar, abordando campos como la Computación, Bioquímica, Ciencias Sociales, y Economía entre otros. Partiendo de enfoques propios de la Física Teórica y Computacional, se desarrollan herramientas y métodos que permiten realizar una investigación de vanguardia, ampliando los límites tradicionales de dichos campos.

Responsable del Área de Física: Jesús Gómez Gardeñes.

Líneas de investigación:

Líneas	Responsables
Vidrios de espín	IP Alfonso Tarancón
Modelos físicos de biomoléculas	IP Fernando Falo
Sistemas complejos y Redes	IP Yamir Moreno
Dinámica molecular y estructura electrónica	IP Jesús Clemente Gallardo



2.1.3.1. Vidrios de Spín.

Investigador Principal: Alfonso Tarancón.

Objetivo y descripción. El objetivo de esta línea se centra en el estudio teórico de vidrios de espín, paradigma de los sistemas complejos, a través de diversas técnicas computacionales.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Alfonso Tarancón Lafita / Catedrático Universidad de Zaragoza	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados	
Andrés Cruz Flor/Prof Emérito	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
Luis Antonio Fernández Pérez/UCM	-
Victor Martín Mayor/UCM	-
Juan Jesús Ruíz Lorenzo/UNEX	-
David Íñiguez / ARAID. UZ	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
Javier Moreno Gordo/UZ	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
David Yllanes/Syracuse,NY	-
Antonio Gordillo Guerrero/UNEX	-
Andrea Maiorano/U.Sapienza,Roma	-
Sergio Pérez Gavero/CUD	-
Beatriz Seoane/LTP, Paris	-
MarcoBaity-Jesi/ U.Sapienza, Roma	-

Logros en 2017

Mediante simulaciones en los ordenadores dedicados Janus y Janus II se ha reproducido un experimento que mide la longitud de la coherencia del vidrio de espín a través de la reducción de las barreras de energía libre inducidas por el efecto Zeeman. El valor de la longitud de coherencia estimada a través del análisis de funciones de correlación microscópicas resulta ser cuantitativamente consistente con su medición a través de funciones de respuesta macroscópicas

2.1.3.2. Modelos Físicos de Biomoléculas

Investigador Principal: Fernando Falo.

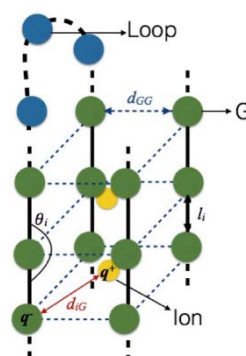
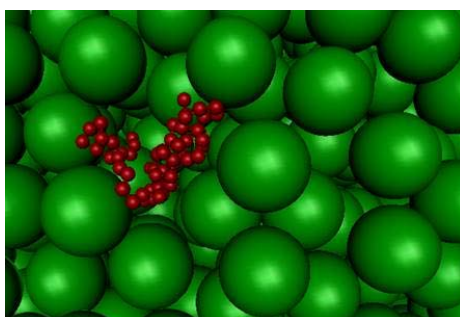
Objetivo y descripción. El objetivo fundamental del grupo de “Modelado Físico de Biomoléculas” es el estudio de las propiedades estructurales y dinámicas de biomoléculas (DNA y proteínas) mediante modelos a distintas escalas de descripción y mediante técnicas de simulación numérica (Monte Carlo y Dinámica Molecular) y técnicas de mecánica estadística.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Fernando Falo Forniés, Profesor Titular	E19-Grupo de Física Estadística y No Lineal
Investigadores implicados Pierpaolo Bruscolini, Prof. Contratado Dr. Antonio Rey Gayo, Catedrático, UCM	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos NA

Logros en 2017

- Se ha estudiado la dinámica de una proteína sencilla a través de Markov State Models, siguiendo el enfoque propuesto por M.Cameron. Este enfoque se basa en la determinación de los autovalores y autovectores de la matriz de transición a través del estudio de los subgrafos del MSM, permitiendo una determinación intuitiva de la dinámica de clustering de cuencas cinéticas asociadas a los varios autovalores. Además, se ha desarrollado un método novedoso para la clasificación de secuencias de anticuerpos murinas y humanas a través de un modelo de Maximal Likelihood, como paso previo a estudios de humanización in silico de anticuerpos, es decir, del desarrollo de secuencias humanas, que mantienen la parte funcional de las secuencias murinas de partida, y que representan un paso intermedio en el desarrollo de nuevos fármacos biológicos
- Hemos completado la definición de un modelo de plegamiento de proteínas basado en estructuras nativas determinadas por RMN, teniendo así en cuenta la flexibilidad intrínseca de las conformaciones plegadas. Por otra parte, hemos iniciado el estudio del plegamiento en entornos confinados y “abigarrados”, para reproducir el fenómeno de “crowding” intentando modelar, a nivel muy sencillo, las condiciones existentes en el medio celular.
- Se ha propuesto un modelo mesoscópico (“coarse-graining”) para el estudio del desplegamiento mecánico de las estructuras G-quadruplex del DNA.



2.1.3.3. Sistemas Complejos y Redes

Investigador Principal: Yamir Moreno.

Objetivo y descripción: El objetivo es estudiar la dinámica y estructura de redes y sistemas complejos en sistemas naturales, biológicos y sociotecnológicos.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Yamir Moreno/Contratado Dr.	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Investigadores implicados	
Luis Mario Floría/Catedrático	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Jesús Gómez Gardeñes/Prof. Contr. Dr.	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Sandro Meloni/Juan de la Cierva	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Pablo Piedrahita	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Carlos Gracia Lázaro	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Sergio Arregui	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Dan Lu	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Alberto Aleta	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Agnieszka Czaplicka	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)

Logros en 2017

- Se han publicado 18 artículos JCR en esta línea en el año 2017.
- Se ha consolidado el laboratorio experimental “Nectunt”, como parte del proyecto europeo IBSEN y que se dedicara a la realización de experimentos para analizar el comportamiento humano en la toma de decisiones estratégicas. En este sentido, se creó una Unidad Mixta de Investigación entre la Universidad de Zaragoza, la Universidad de Valencia y la Universidad Carlos III de Madrid para continuar desarrollando esta línea de investigación.
- Se publicaron 7 artículos que pertenecen al primer decil de su categoría.

2.1.3.4. Dinámica Molecular y Estructura Electrónica

Investigador Principal: Jesús Clemente Gallardo.

Objetivo y descripción. Nuestro grupo se ocupa de la aplicación de métodos teóricos y computacionales para el estudio del comportamiento de sistemas biológicos y de materia condensada. La mayor parte de nuestros métodos se basan en la mecánica cuántica y en el desarrollo de mecanismos para combinarlos, de forma eficiente, con métodos clásicos. Trabajamos en un amplio rango de aspectos, desde los más teóricos a los más aplicados. Entre ellos podemos destacar la dinámica no adiabática de sistemas moleculares, los fundamentos y aplicaciones de la teoría del funcional de densidad dependiente del tiempo, el análisis de procesos químicos empleando DFT, el control óptimo de sistemas cuánticos y los fenómenos de transporte de ondas en medios complejos.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Jesús Clemente Gallardo/Contratado Dr Investigadores implicados José Luis Alonso Buj / Catedrático (UZ) Alberto Castro / Fundación ARAID Fernando Falceto / Profesor Titular(UZ) Víctor A. Gopar / Profesor Titular (UZ) Víctor Polo Ortiz / Profesor Titular (UZ)	E24/1 -Física matemática y Teoría de campos E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos E24/2 - Grupo Teórico de Altas Energías E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos E07-Catálisis homog. por Comp. Organometálicos

Logros en 2017

- Se ha estudiado mediante técnicas de control óptico cuántico el problema del mínimo tiempo de ionización de átomos mediante láseres ultra-rápidos y ultra-intensos [Kammerlander et al., Eur. Phys. J B 90, 91 (2017).
- Hemos investigado los efectos de impurezas y/o imperfecciones en el transporte electrónico en los llamados aislantes topológicos. Por otro lado, hemos hecho una extensión del análisis del transporte de ondas a través de sistemas con desorden tipo Lévy de un sólo canal al caso de multicanal.
- Se ha adaptado la descripción tensorial de sistemas cuánticos abiertos para permitir caracterizar la variedad de estados mixtos e implementar la dinámica de tipo markoviano como una transformación sobre el espacio de tensores de la misma.
- Se han estudiado computacionalmente los mecanismos de reacción de diversos procesos catalíticos en fase homogénea, destacando el uso de grupos directores en la siliación de enlaces C-H en moléculas aromáticas o el papel del oxidante en la preparación de carbamatos. Este año se ha comenzado una nueva línea de investigación centrada en el estudio computacional de mecanismos de reacción en catálisis heterogénea, concretamente en el empleo de perovskitas en la reducción de oxígeno.

2.1.4. Área de Computación

Objetivo: Realiza investigación en software y hardware, desarrolla actividades de Ciencia Ciudadana y modelos Big Data Proporciona infraestructuras de computación a investigadores y empresas.

Responsable del Área de Computación: David Iñiguez.

Líneas de investigación:

Lineas	Responsables
Computación de altas prestaciones	IP Sergio Hernández
Computación Grid&Cloud	IP Rubén Vallés
Ciencia Ciudadana	IP Jesús Clemente
Ordenadores dedicados	IP Sergio Pérez Gaviro
Analítica de datos, visualización avanzada y transferencia tecnológica	IP Gonzalo Ruíz



2.1.4.1. Computación de Altas Prestaciones

Investigador Principal: Sergio Hernández.

Objetivos y descripción. Investigación en Computación de Altas Prestaciones (HPC). Mantenimiento y soporte de las infraestructuras de supercomputación del BIFI.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Sergio Hernández / contratado	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados Guillermo Losilla Anadón / contratado Patricia Santos Marco / contratado	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos

Logros en 2017

- Se ha prestado un servicio de cálculo y almacenamiento estable y de calidad para los investigadores del Instituto, sus colaboradores y otros usuarios externos, con un total de 23 millones de horas de CPU prestadas en 2017, superando de nuevo el record establecido el año anterior.
- Se ha mejorado el centro de procesamiento de datos con la renovación de uno de los Sistemas de Alimentación Ininterrumpida (SAI) que protege los computadores ante caídas de la red eléctrica.
- Se ha organizado y participado en varios eventos para difundir los servicios de cálculo de CESAR entre investigadores y empresas. En el ámbito de la Red Española de Supercomputación (RES), cabe destacar la migración del servicio de la máquina Memento a la máquina Cierzo para poder ofrecer una mayor potencia de cálculo a los investigadores de la RES.
- Como parte de las actividades de la red, se ha seguido participando activamente en el grupo de trabajo "RESxPYME", cuyo objetivo es fomentar la innovación en la PYME española mediante la implantación de soluciones HPC.



2.1.4.2. Computación Grid&Cloud

Investigador Principal: Rubén Vallés.

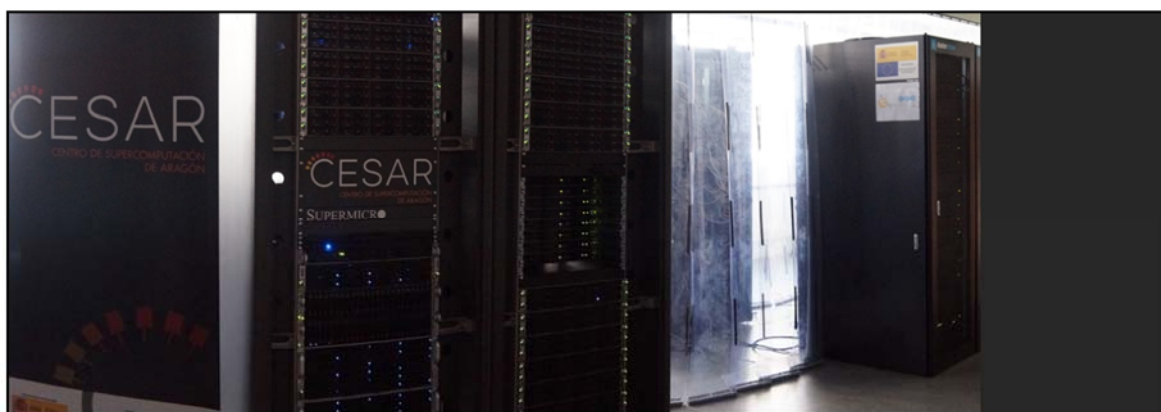
Objetivo y descripción. Investigación con infraestructuras de computación distribuidas de tipo Grid y Cloud.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Rubén Vallés Pérez/ contratado	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados Carlos Gimeno / contratado	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos

Logros en 2017

- Se ha afianzado la oferta de servicios cloud y Big Data a empresas y centros de investigación a través de la nueva infraestructura cloud Colossus perteneciente a CESAR:
 - 0 CESAR <http://cesar.unizar.es/>
 - 0 Colossus: <https://colossus.cesar.unizar.es>
- Se ha participado activamente en proyectos de desarrollo e integración de entornos de simulación en cloud con empresas como INYCOM, Podoactiva, Nablado, Biocurve, Schnell Software, Kliux e ITAINNOVA.
- Se ha participado en diversos proyectos europeos: Fortissimo 2 y EGI-Engage.



2.1.4.3. Ciencia Ciudadana

Investigador Principal: Jesús Clemente Gallardo.

Objetivo y descripción. Proyectos para la involucración ciudadana en actividades de investigación científica, el reconocimiento de las comunidades fuera de la academia como generadores de conocimiento y tecnología, y la creación de una cultura científica abierta a la sociedad.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Jesús Clemente Gallardo (Contratado Dr)	E24/1 -Física matemática y Teoría de campos
Investigadores implicados	
Laude Guardia/Contratada F.Ibercivis	-
Cristina Hernández /Contratada	-
M.Carmen Ibáñez/Contratada F.Ibercivis	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
Maite Pelacho/ Contratada F. Ibercivis	-
Francisco Sanz/Contratado	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
Fermin Serrano/Contratado F.Ibercivis	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos

Logros en 2017

- Colaboración con la Fundación Ibercivis para el desarrollo de varios de sus proyectos sobre Ciencia Ciudadana, en particular: el Observatorio de la Ciencia Ciudadana en España II, Aqua II, el Plan de Acción para el Desarrollo y Consolidación de la Ciencia Ciudadana en España, la EU-tender action “*Study on an inventory of citizen science activities for environmental policies*” y Vigilantes del Cierzo (para más detalles, ver <http://www.ibercivis.es>).
- Proyecto Drones y Mazmorras impulsado por A.Tarancón, IP de todos los equipamientos del CESAR que se han empleado en el desarrollo. Se ha contado con la colaboración de la F. Ibercivis y el Gob.de Aragón y la cofinanciación de Fecyt. El proyecto pretende acercar las nuevas tecnologías a los jóvenes a través del estudio de castillos, palacios, torreones o edificaciones históricas de su entorno.
- Proyecto Micromascotas, coordinado por C. Hernández y J. Clemente Gallardo, con la colaboración de la F. Ibercivis y la cofinanciación de Fecyt. Este proyecto busca crear una plataforma para fomentar el conocimiento de los diversos microorganismos que nos rodean: bacterias, hongos o ácaros y la relación que tienen con el ser humano y nuestro entorno, destacando aspectos de interés biotecnológico así como introducirles en la fabricación de biohardware con objetivos didácticos.
- Presentaciones de F. Sanz y F. Serrano en el marco de la *2nd Annual Conference on participatory research, Citizen Science and FabLabs for peace and development*, parte del *9th Geneva Forum*, United Nations, Ginebra, Diciembre 2017
- Dentro de las actividades desarrolladas dentro de los laboratorios Cesar, coordinados por F. Sanz, se han llevado a cabo:
 - o Convocatoria de proyectos CESAR
 - o Proyectos ciudadanos como *Cansat* (concurso de diseño de microsátélites co-organizado con la Agencia Espacial Europea) o *Prometeo* (diseño de herramientas de ahorro energético mediante tecnologías libres)
 - o Asistencia científica y tecnológica para los artistas nacionales y extranjeros que han participado en el programa de residencias en Etopia (OPN, bioestetica, Konforest).
 - o Creación de la línea de bioarte y los talleres científico-prácticos familiares.

2.1.4.4. Ordenadores dedicados

Investigador Principal: Sergio Pérez Gaviro.

Objetivo y descripción. Diseño de nuevos supercomputadores especializados en determinadas aplicaciones con prestaciones muy superiores a los convencionales y explotación de los mismos.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo DGA
Sergio Pérez Gaviro/CUD	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados	
Andrés Cruz Flor/Prof Emérito	-
Luis Antonio Fernández Pérez/UCM	-
Victor Martín Mayor/UCM	-
Juan Jesús Ruíz Lorenzo/UNEX	-
Alfonso Tarancón Lafita / Catedrático UZ	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
Antonio Gordillo Guerrero/UNEX	-
David Iñiguez Dieste/ARAID	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos

Logros en 2017

Durante el año 2017, los ordenadores de propósito especial, JANUS y JANUS II, diseñados por nuestro equipo, han sido de nuevo usados de manera intensiva continuando la campaña de simulación que había emprendido el año 2015. Gracias a estas simulaciones hemos podido obtener resultados muy relevantes que han aportado un nuevo foco de luz en la comprensión de los Sistemas Complejos. En concreto, hemos conseguido dos publicaciones en dos prestigiosas revistas científicas internacionales de alto impacto científico: Proceedings of the National Academy of Sciences y Physical Review Letters. Además, ambas máquinas han continuado su labor en otra nueva campaña de simulación iniciada este año.



2.1.4.5. Analítica de Datos, Visualización Avanzada y Transferencia Tecnológica

Investigador principal: Gonzalo Ruiz.

Objetivos y descripción. Proyectos de investigación que requieren diseño y desarrollo de software.

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Identificación Grupo GA
Gonzalo Ruiz Manzanares / Contratado	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados	
Alfredo Ferrer Marco / Contratado	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
Alejandro Rivero/PI	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos
David Iñiguez Dieste/ARAID	E24/3-Biocomp. y Física de Sistemas Complejos

Logros en 2017

- Desarrollo del proyecto del proyecto “Drones y Mazmorras” en el que colegios e institutos de Aragón han podido hacer maquetas y recreaciones de castillos, palacios, torreones y fortalezas de Aragón ayudándose de drones y tecnologías avanzadas de fabricación. Dicho proyecto ha tenido una gran repercusión a nivel regional.
- Participación en el desarrollo del proyecto IBSEN del programa europeo H2020, diseñando y desarrollando experimentos socioeconómicos para estudiar el comportamiento humano.
- Cierre del proyecto SAPPORO con la empresa Codeoscopic, sobre el que se están preparando diversas publicaciones, y que va a tener varias líneas de continuación relacionadas como el Machine Learning

2.2. Infraestructuras del BIFI

Una gran parte de las infraestructuras del Instituto BIFI se ubican en el Edificio I+D, situado del Campus Río Ebro de la Universidad de Zaragoza. El BIFI cuenta con 20 laboratorios, 22 despachos y algunas salas comunes distribuidos en las 3 plantas del edificio.

Nuestras infraestructuras singulares proporcionan a los investigadores prestaciones específicas y especializadas para sus trabajos de investigación. Estos equipamientos dan servicio tanto a los investigadores del BIFI como a investigadores externos. También son utilizados por entidades públicas y privadas.

2.2.1. Infraestructuras de Física y Computación

Por infraestructura computacional, el Instituto se sitúa en el “top 5” de centros de supercomputación y e-Ciencia nacionales, encontrándose muy bien posicionado a nivel europeo. La reciente puesta en marcha del Centro de Supercomputación de Aragón (CESAR) ha reforzado el rango de sistemas de cálculo disponible, cubriendo todo el espectro de la computación actual: supercomputadores de memoria distribuida y compartida combinados con aceleradores (GPUs, Phi), sistemas más “desacoplados” de computación distribuida (cloud, computación voluntaria, grid) y ordenadores dedicados o de propósito específico basados en procesadores FPGAs y diseñados por nosotros mismos. Por otro lado, el CESAR ha traído nuevas infraestructuras de ciencia ciudadana ubicadas en el Laboratorio de Innovación Abierta en Etopía. Como complemento, y para la divulgación de sus investigaciones, el BIFI cuenta con sus propios laboratorios de visualización y de realidad aumentada.

CESAR – Laboratorio Supercomputación (LSC)

Descripción. El Laboratorio de Supercomputación del Centro de Supercomputación de Aragón (CESAR-LSC), es un CPD de tamaño medio situado en el Edificio I+D del Campus Río Ebro. El laboratorio aloja la mayor parte de la infraestructura computacional del BIFI, que actualmente equivale a 10.000 cores y 200 TeraFLOPS de potencia de cálculo. Entre los sistemas de computación de altas prestaciones (HPC) y de Cloud computing alojados, destacan:

- Cierzo (HPC): 2080 cores, 7,31TB RAM, Iband 56Gbps, 219TB storage, 85,9 TFLOPS
- Colossus (Cloud): 1632 cores, 20TB RAM, 10GE, OpenStack middleware + KVM hypervisor, 600 TB Ceph-based distributed storage
- Memento/CAESARAUGUSTA II (HPC): 3072 AMD64 cores, 12TB RAM, Iband QDR 40Gbps, 51TB (net) storage, 25,8 TFLOPS R_{peak}
- AraGrid (Cloud): 2000 cores distribuidos en 4 nodos, 4TB RAM, OpenStack, 200TB.
- Terminus (HPC): 996 cores, 3 TB RAM, GE + Iband 2Gbps, 12 TB storage, 8 TFLOPS.



Cierzo



Colossus



Memento /
CAESARAUGUSTA II

Investigador/Técnico responsable/coordinador. Sergio Hernández de Mesa (HPC), Rubén Vallés Pérez (Cloud).

Investigadores/Técnicos implicados. Patricia Santos Marcos, Carlos Gimeno Yáñez.

Metodología y técnicas disponibles. <http://cesar.unizar.es>

Comentarios de interés. Sólo a través de nuestros 3 sistemas HPC, en 2017 se han prestado 23 millones de horas de CPU.

Ordenadores dedicados

Descripción. JANUS y JANUS II son ordenadores de propósito especial basados en procesadores reprogramables FPGA.



Una de las 16 placas de
JANUS



Una de las 16 placas de JANUS II

Investigador/Técnico responsable/coordinador. Sergio Pérez Gaviro.

Investigadores/Técnicos implicados. David Iñiguez Dieste, Alfonso Tarancón Lafita, Jorge Monforte, José Miguel Gil.

Metodología y técnicas disponibles. Ambas máquinas dedicadas están optimizadas en simulaciones de MonteCarlo. Dada su flexibilidad, ambos permiten simular diferentes modelos a velocidades entre 1000 y 100.000 por encima de procesadores convencionales.

Más info: <http://bifi.es/spc> y <http://www.janus-computer.com>

Visualización avanzada

Descripción. El laboratorio de visualización se encuentra en la Sala Multimedia del instituto, y contiene una infraestructura de visualización estéreo pasivo, otra de visualización estéreo activo, y una serie de dispositivos que permiten la inmersión e interacción (cámaras infrarrojos, mando bluetooth wiimote y dispositivo Kinect). El sistema completo permite visualizar en estéreo y posicionarse dentro diversas escenas, en tiempo real o mediante un vídeo.



El laboratorio de realidad aumentada, accesible online, permite la simulación de diferentes escenarios físicos sencillos (actualmente un péndulo, un muelle con una carga y una caída libre). Dichos experimentos son realizados de forma totalmente automática gracias a una serie de motores, controladores y sensores eléctricos, y gracias a una cámara web, se captan imágenes de ellos que permiten el análisis de los movimientos de los elementos que intervienen así como la superposición de resultados calculados teóricamente para comprobar su corrección.

Investigador/Técnico responsable/coordinador. Gonzalo Ruiz

Investigadores/Técnicos implicados. Alfredo Ferrer

CESAR – Laboratorio de Innovación Abierta (LIA)

Descripción. Las infraestructuras de ciencia ciudadana posibilitan la investigación tanto en lo que respecta al desarrollo de proyectos de ciencia ciudadana como a su investigación como materia. Esta infraestructura está dividida en dos partes: el Laboratorio de Innovación Abierta del Centro de Supercomputación de Aragón en Etopia (CESAR-LIA) y la infraestructura del proyecto IBERCIVIS. Los primeros dan soporte a makers, investigadores y ciudadanos que trabajen en proyectos de diversa índole dejando a su disponibilidad herramientas distribuidas en un taller de fabricación, de visualización, de prototipado, de robótica y un wetlab. Por su parte, IBERCIVIS proporciona una infraestructura de computación ubicada dentro del Centro de Procesamiento de Datos (CPD) del BIFI que da soporte de almacenamiento y computación a los proyectos de ciencia ciudadana desarrollados por su grupo de investigación.

Investigador/Técnico responsable/coordinador. Jesús Clemente, Fermín Serrano.

Investigadores/Técnicos implicados. Francisco Sanz, Mari Carmen Ibáñez.

Metodología y técnicas disponibles. CESAR-Laboratorio de Innovación Abierta: <http://cesar-etopia.bifi.es>, IBERCIVIS: <http://www.ibercivis.es>



Laboratorio de robótica



Laboratorio de prototipado

2.2.2. Infraestructuras Bioquímica y Biofísica

Los laboratorios se organizan según técnicas y equipos, se dedican a aplicaciones específicas y no se atribuyen a grupos de investigación concretos. De esta forma se consigue que todos los investigadores puedan hacer uso cómodamente de las instalaciones y que la distribución y redistribución del espacio sea más eficaz.

Investigador/Técnico responsable/coordinador. Olga Abián y Ramón Hurtado.

Investigador/Técnico implicado. Sonia Vega.

Metodología y técnicas disponibles.

Las técnicas y metodologías disponibles específicas de carácter bioquímico y biofísico se enumeran a continuación:

- **Biología Molecular:** Ingeniería genética y proteínas recombinantes (clonación, mutagénesis, expresión de proteínas recombinantes de interés biotecnológico o biomédico).
- **Bioquímica:** Purificación de proteínas, ácidos nucleicos y pequeñas moléculas orgánicas mediante cromatografía líquida utilizando columnas de intercambio iónico, afinidad, exclusión molecular y fase reversa. Ensayos enzimáticos, estructurales y funcionales con proteínas y ácidos nucleicos.
- **Biofísica de moléculas biológicas:** Caracterización de la estabilidad de proteínas, de la interacción proteína-proteína y proteína-ligando y de la función de proteínas.
- **Biología Celular:** Cultivos de células procariotas y eucariotas para expresión de proteínas recombinantes, determinación de eficacia y toxicidad de compuestos bioactivos, y estudios sobre apoptosis. Cultivos de células madre para estudios de diferenciación celular y muerte celular.

- **Cribado de Alto Rendimiento:** Métodos de cribado experimental para la búsqueda e identificación de compuestos bioactivos frente a dianas farmacológicas o proteínas de interés biotecnológico.
- **Cristalografía:** Obtención de estructuras cristalográficas de proteínas: generación de cristales, análisis de los mismos mediante difracción de rayos X, procesamiento de los datos obtenidos y resolución de estructuras moleculares.

Equipamiento único en Aragón:

Laboratorio de interacciones biomoleculares:

Calorímetros isotérmicos de titulación VP-ITC (MicroCal, GE Healthcare).

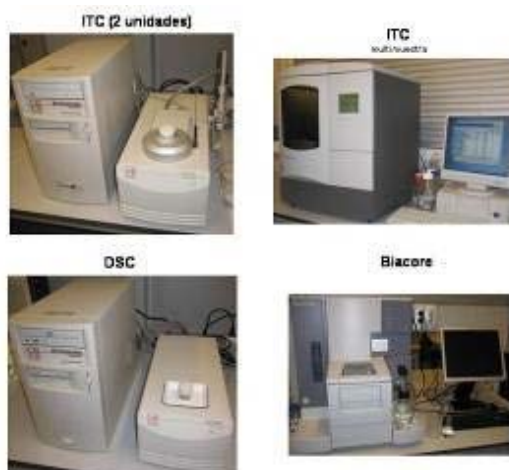
Calorímetro automatizado de titulación AUTO-ITC200 (MicroCal, GE Healthcare).

Calorímetro diferencial de barrido VP-DSC (MicroCal, GE Healthcare).

Equipo de resonancia de plasmones superficiales Biacore T200 (GE Healthcare).

Laboratorio de Rayos X de proteínas:

Difractómetro de Rayos X modelo X8 Prospector (Bruker)



Equipamiento adjudicado y adquirido en 2017:

Equipo de fluorescencia de partícula única para el estudio de biomoléculas (UNZA15-EE-2922). Se trata de un microscopio de fluorescencia confocal con resolución temporal y con capacidad de detección de partículas únicas (MicroTime 200, PicoQuant). Este equipo permite la detección de fotones únicos con una resolución espacial de 50 nm (con el módulo STED) y temporal del orden de picosegundos. Este equipo permite la caracterización espectroscópica de la estructura y dinámica de moléculas únicas en soluciones complejas, biofluidos e incluso dentro de células vivas mediante técnicas de fluorescencia de última generación como FLIM, FLIM/FRET y FLCS en régimen PIE (Pulsed Interleaved Excitation) con cuatro canales distintos de recogida de señal simultáneos.

New Brunswick S41i Incubador Shaker, un agitador incubador para preparar cultivos celulares en atmósfera de CO₂ con agitación. Esto permitirá expresar proteínas/enzimas complejas para su posterior caracterización biofísica.

SISTEMA ÄKTAprime GE con software y armario refrigerado. ÄKTAprime plus es un sistema de cromatografía a escala de laboratorio que realiza purificaciones de proteínas marcadas y no marcadas, así como de anticuerpos

Equipamiento adjudicado de próxima adquisición:

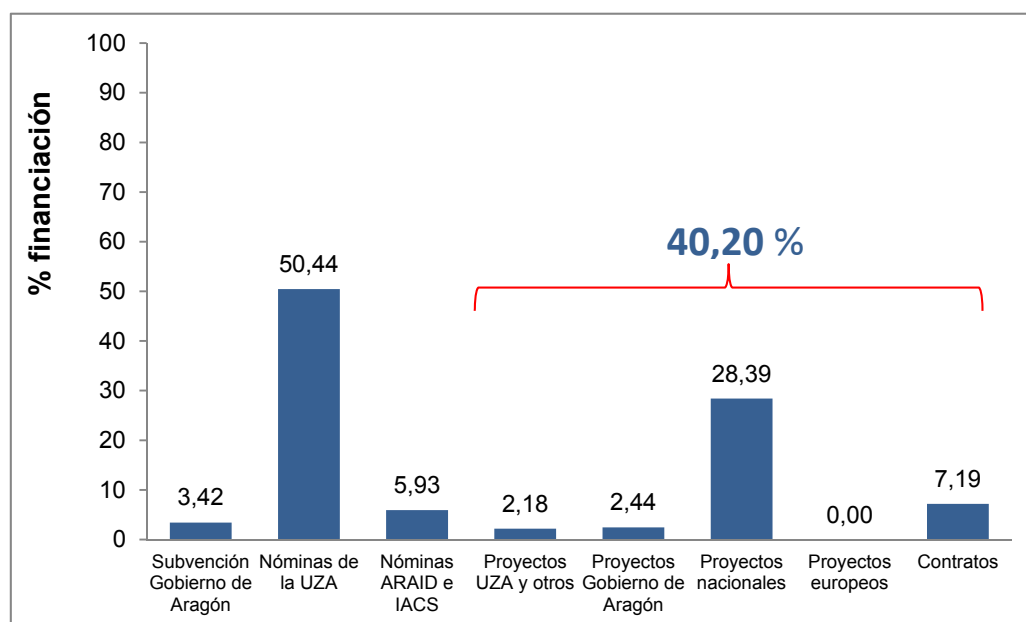
La infraestructura del BIFI se verá ampliada en 2018, con equipamiento para el que se concedió ayuda FEDER dentro del Subprograma Estatal de Infraestructuras Científicas y Técnicas y equipamiento en el marco del Plan Estatal De Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2013-2016, en la convocatoria de 2015. Se trata del nuevo equipamiento para el Laboratorio Avanzado de Cribado e Interacciones Moleculares de Aragón (LACRIMA, UNZA15-EE-3250), que complementará dicha infraestructura.

3. Estructura de financiación: captación de recursos y destino de los mismos

La financiación del Instituto BIFI proviene de una subvención otorgada por el Gobierno de Aragón, de la financiación basal de la Universidad de Zaragoza (las nóminas de los PDI y de un único PAS), de la captación de recursos a través de la concurrencia a convocatorias de proyectos de investigación de distintas administraciones (Unión Europea, Ministerio de Economía y Competitividad del Gobierno de España y Gobierno de Aragón) y de la firma de contratos con distintas empresas y entidades privadas para desarrollar proyectos de investigación.

En la tabla y figura siguientes se resume la estructura de la financiación del Instituto durante el año 2017, considerando únicamente los proyectos comenzados en 2017 cuyo investigador principal (IP) es miembro del BIFI.

	Euros	%
Subvención Gobierno de Aragón	145.433,52	3,42
Nóminas de la UZ	2.142.000,00	50,44
Nóminas ARAID e IACS	252.000,00	5,93
Proyectos UZ y otros	92.718,50	2,18
Proyectos Gobierno de Aragón	103.514,08	2,44
Proyectos nacionales	1.205.658,00	28,39
Proyectos europeos	0,00	0,00
Contratos	305.304,00	7,19
TOTAL FINANCIACIÓN	4.246.628,10	100



3.1. Financiación basal proporcionada por el Gobierno de Aragón

La financiación del Gobierno de Aragón, que proviene de la ayuda que concede a los IUI anualmente, supone para el BIFI un 3,42% de su financiación total.

APOYO GOBIERNO DE ARAGÓN AL BIFI	Importe 2017 (€)
Financiación a institutos de investigación de Aragón	145.433,52

3.2. Financiación proporcionada por las nóminas de la Universidad de Zaragoza

La Universidad de Zaragoza aporta indirectamente a la financiación del BIFI las nóminas de las personas que forman parte de la plantilla del propio centro. Asumiendo un salario medio de 42.000 €, estimamos que esta financiación constituye el 50,44% de la global del instituto. Sin embargo, cabe señalar que dicha financiación cumple también el propósito de permitir el desarrollo de las actividades docentes de los profesores, por lo que nos resulta muy difícil estimarla con precisión.

APORTACIÓN UZ	Importe 2017 (€)
Nóminas personal bifi de la UZ	2.142.000

3.3. Financiación proporcionada por las nóminas de ARAID, IACS y CUD

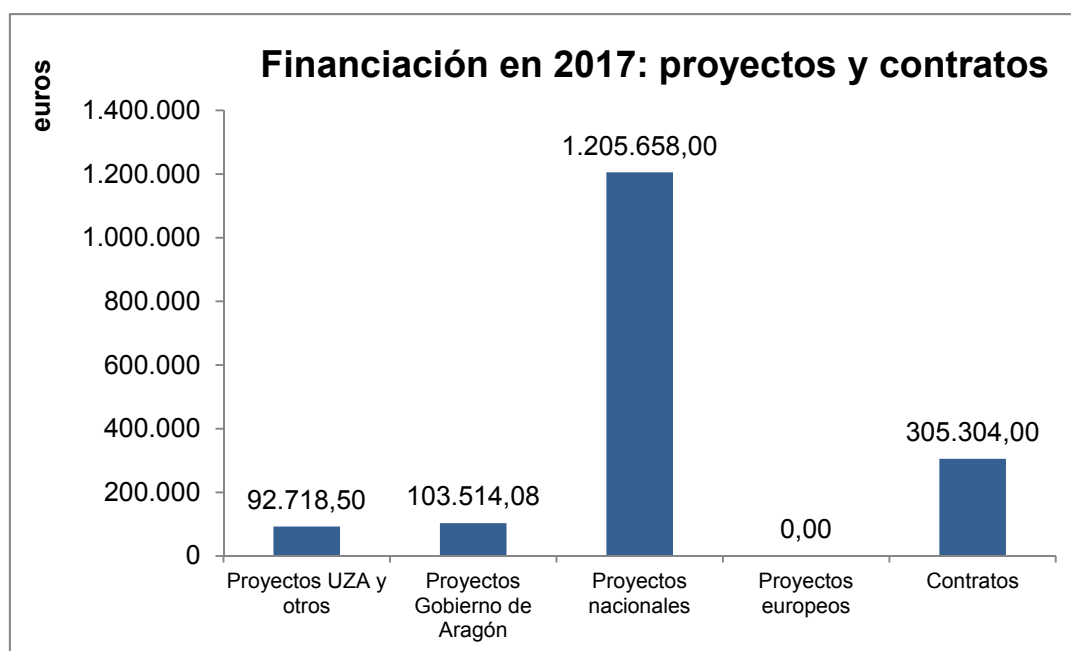
Se consideran aquí los salarios de las 7 personas contratadas por ARAID, IACS y CUD, que son miembros adscritos del BIFI, estimando el mismo salario medio de 36.000 €.

APORTACIÓN ARAID E IACS	Importe 2017 (€)
Nóminas personal adscrito	252.000

3.4. Financiación obtenida en convocatorias de carácter público y concurrencia competitiva: europeos, nacionales y autonómicos, otros y proyectos con empresas y otras entidades

En 2017, los ingresos procedentes de las propuestas en convocatorias públicas y de concurrencia competitiva con fecha oficial de inicio correspondiente el año 2017 y cuyo investigador principal es un miembro del BIFI, han constituido el 33% del total de la financiación.

El desglose de las cantidades obtenidas en estos proyectos competitivos es el siguiente:



3.4.1. Proyectos de carácter europeo

Este año 2017 no se han comenzado nuevos proyectos europeos.

3.4.2. Proyectos de carácter nacional

Los proyectos nacionales suponen un 28,39 % de la financiación total del instituto. Los títulos y el importe de los proyectos nacionales conseguidos por los investigadores del BIFI se muestran en la tabla siguiente:

<i>Proyectos nacionales</i>	<i>Importe ayuda (€)</i>
FCT-16-11204: drones y mazmorras.	10.000,00
FCT-16-11591: micromascotas	30.000,00
BFU2015-72190-EXP: Ingeniería de genomas multiplex e iterativa (mige) en mycobacterium. Aplicación al desarrollo de herramientas para la búsqueda de nuevos antibióticos.	54.450,00
GALNAC-TS, preferencias de glicosilación, alfa klotho, cristalografía, microscopía electrónica, péptidos inhibitorios	266.200,00
Estructura, energética y simulación de conformaciones (parcialmente) desplegadas de las proteínas. Hacia modelos atómicos cuantitativos de la estabilidad de las proteínas	205.700,00

Evolución de caracteres biológicos y procesos de especiación en el género modelo brachypodium (poaceae) mediante análisis de genómica comparada y funcional. CGL2016-79790-P	200.000,00
Flavoenzimas: mecanismos y dianas moleculares, patología y aplicaciones biotecnológicas. BIO2016-75183-P	211.750,00
Multiplex iterative genome engineering (mige) in mycobacterium. Applications to development of genetic tools for testing new antibiotics myco-mige BFU2015-72190-EXP	45.000,00
Dapie: diseño y fabricación personalizados automatizados en la nube	8.318,00
Diseño racional de glicomiméticos inhibidores de glicosiltransferasas	174.240,00
Total	1.205.658,00

3.4.3. Proyectos de carácter autonómico

La financiación obtenida a través de convocatorias de concurrencia competitiva, que proceden del Gobierno de Aragón supone un 2,44% de la financiación total del BIFI. El título y el importe de estos proyectos se muestran en la tabla siguiente:

PROYECTOS AUTONÓMICOS	Importe ayuda (€)
VII national conference BIFI 2017	812,08
X reunión de micobacterias mycospain-mycosar (ii reunión científica myconet)	1.542,00
SAI para CPD del instituto BIFI	18.000,00
New brunswick S41I incubador shaker	11.500,00
Sistema äkta prime ge con software y armario refrigerado	17.900,00
Convenio de colaboración entre el gobierno de aragón y la universidad de zaragoza para el soporte del nodo de aragón en la red española de supercomputación en al año 2017	51.635,00
Sistema de almacenamiento terciario para grandes cantidades de datos de respaldo en el CPD del BIFI	2.125,00
TOTAL	103.514,08

3.4.4. Proyectos de la UZ y otras fuentes de financiación

La Universidad de Zaragoza, además de cofinanciar al instituto con las nóminas de su personal en el BIFI, abre cada año convocatorias a las que pueden concurrir los grupos de investigación. En este tipo de convocatorias el instituto BIFI ha obtenido un 2,18% de su financiación para el 2017. Estas ayudas apoyan proyectos de diferente índole como puede verse en la tabla siguiente:

PROYECTOS UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA Y OTROS	Importe ayuda (€)
BIFI VIII national conference	682,00
Reparación de un espectrofotómetro uv-visible con software windows (CARY WINUV)	800,00
Reparación de un sistema de alimentación ininterrumpida (sai), mod. GE LP33	1.000,00
Reparación de una centrifuga Beckman AVANTI J-E	1.900,00
UZ2017-BIO-02: estudio de factores genéticos y ambientales que modulan la formación y estabilidad de los supercomplejos respiratorios.	3.000,00
UZ2017-BIO-01: transcripcionales preliminares de m-tuberculosis en condiciones de persistencia inducida por los macrófagos.	3.000,00
UZ2017-SOC-03: cooperación y generosidad.	1.000,00
X congreso nacional de micobacterias- mycospain (II reunión científica myconet).	750,00
UZCUD2017-BIO-02: Estudio de la interacción del factor de inducción de apoptosis humano (HAIF) con sus parejas fisiológicas mediante espectroscopía de epr y estudios de expresión celular.	1.500,00
Nuevas estrategias personalizadas para combatir enfermedades de origen infeccioso y de origen molecular (consorcio de tecnologías para la salud). INFECMOL	18.000,00
Bigdata y computación en ciencias de la salud	17.500,00
Ningún paciente de fenilketonuria sin un tratamiento eficaz	14.962,00
Desentrañando el origen y los mecanismos de la poliploidía en un género de gramíneas modelo (brachypodium) ampliamente representado en aragón.	3.592,00
Estudio de factores genéticos y ambientales que modulan la formación y estabilidad de los supercomplejos respiratorios	3.000,00
Biodegradación de lindano por cianobacterias: estudio de su potencial utilización en bioremediación, y bases moleculares para el desarrollo de un biosensor	3.000,00
The share of paid and unpaid work between women and men	19.032,50
TOTAL	92.718,50

La financiación del BIFI mediante contratos para el desarrollo de proyectos de investigación con empresas u otras entidades ha supuesto en 2017 el 7,19 % de la financiación total del instituto.

PROYECTOS CON EMPRESAS	Importe ayuda (€)
Análisis y evaluación de la potencia antimicrobiana de una serie de compuestos suministrados por la empresa (addenda al contrato firmado en 2008)	17.500,00
Extracción y caracterización de ácido hialurónico a partir de tejidos porcinos	16.698,00
Caracterización de compuestos con actividad antituberculosis	119.306,00
Confidencial	10.305,00
Consultoría para uso de cpd en entorno de computación en cloud	1.815,00
Confidencial	1.210,00
Puesta en marcha del desarrollo técnico fotocatalizador	6.050,00
Confidencial	2.420,00
Estudio de la patogenicidad de mutaciones encontradas en el gen atad3c en un paciente con síntomas de patología mitocondrial	130.000,00
TOTAL	305.304,00

3.5. Estructura de gastos e ingresos durante el año 2017

De acuerdo a los datos económicos aportados por Vicegerencia de Investigación de la Universidad de Zaragoza, la estructura de gastos del instituto en 2017, se distribuye según la siguiente tabla:

Gastos del ejercicio 2017 clasificados por tipo de gasto (importes totales con IVA)	Importe en €
Asignación conferenciantes no UZ	618,00
Equipo Laboratorio	125.653,66
Fungible	284.036,41
Gastos Generales	243.135,56
Informática	48.171,68
Libros	1.019,64
Personal	819.844,90
Mobiliario	133,10
Viajes	139.466,87
TOTAL	1.662.079,82

Así mismo, la estructura de ingresos se refleja en la tabla siguiente:

Ingresos recibidos en el ejercicio 2017 clasificados por financiador		Importe en €
	Autonómico/local	335.286,42
	Nacional	975.200,24
	Europeo	74.367,26
	Empresa	170.090,32
	Otros	-17.203,37
	Sin determinar	2250
	TOTAL	1.539.990,87

4. Actividad Científica, Innovadora y Tecnológica

4.1. Proyectos de investigación

En este apartado se enumeran todos los proyectos de investigación desarrollados por el instituto BIFI durante 2017, incluidos los concedidos en años anteriores que han estado en vigor.

4.1.1. Proyectos de investigación de financiación pública y de concurrencia competitiva

4.1.1.1. Proyectos financiados por entidades europeas

Durante el año 2017, 13 proyectos de investigación financiados por entidades europeas han estado en vigor. Doce de estos proyectos están liderados por investigadores miembros del BIFI.

Se enumeran a continuación, indicando los principales datos de los mismos:

Proyectos activos concedidos antes de 2017 e IP en la UZ miembro del BIFI

FORTISSIMO 2 / Factories of the Future Resources, Technology, Infrastructure and Services for Simulation and Modelling 2 (Grant Agreement N° 680481)
 Unión Europea
 01/11/2016 - 30/04/2018
 77.500 €
 David Iñiguez Dieste

PIREPRED: Red Transfronteriza de interpretación del cribado neonatal: de la mutación al paciente
 UE (INTERREG-POCTEFA)
 2016-2019
 827.008 € / 231.640 € (FEDER 150566 €)
 Javier Sancho

Between atom and cell: Integrating molecular biophysics approaches for biology and healthcare (MOBIEU)
 European Cooperation in Science and Technology (eCOST, COST Action CA15126)
 2016-2020
 520.000 € / 25.000 €
 Adrian Velázquez-Campoy

Defining alpha-synuclein conformers responsible for Parkinson's disease phenotypes in mice
 The Michael J. Fox Foundation
 1/05/2016 - 30/04/2018
 200,000 \$ / 63,312.12 \$
 Nunilo Cremades

Determinants of Life Satisfaction among Minority Elders in the United
 Boston College Institute on Aging
 36 meses
 75.000 \$
 Jose Alberto Molina Chueca

NAREB / Nanotherapeutics for antibiotic resistant emerging bacterial pathogens
 Unión Europea FP7
 01/02/2014 A 31/01/2018
 653.114 €
 José A. Ainsa

Título: Perenniality, abiotic stress tolerance, and biomass allocation in *Brachypodium*, a model grass genus for bioenergy. Proposal 503006.
 Entidad financiadora: Joint Genome Institute, CSP program
 2017-2021
 Importe total del proyecto: 2 TB of genome and transcriptome sequencing
 David Des Marais
 0 €
 Pilar Catalán

EGI ENGAGE / Engaging the EGI Community towards an Open Science Commons
 Unión Europea
 David Iñiguez Dieste
 01/03/2015 - 28/02/2018 Duración: 3 años
 96.000 €
 David Iñiguez Dieste

Distributed Global Financial Systems for Society (DOLFINS)
 Union Europea
 03/2015 – 02/2018
 2.700.000 € / 250.000 €
 Yamir Moreno

Bridging the Gap: from Individual Behavior to the Socio-technical Man (IBSEN)
 Union Europea
 09/2015 – 08/2018
 2.800.000 € / 350.000 €
 Yamir Moreno

Perenniality, abiotic stress tolerance, and biomass allocation in *Brachypodium*, a model grass genus for bioenergy. CSP Proposal 503006.
 Joint Genome Institute (USA), CSP program 2017-2021
 2 TB of genome and transcriptome sequencing
 Pilar Catalán

Quantum structure of spacetime
 EU Framework Programme
 1.6.2015 — 31.5.2019
 78450 € (tercer año)
 José M^a Gracia Bondía

Proyectos activos concedidos antes de 2017 IP no es miembro BIFI

TBVAC2020 / Advancing novel and promising TB vaccine candidates from discovery to preclinical and early clinical development (H2020 - Grant Agreement n° 643381)
 Unión Europea
 01/01/2015- 31/12/2018
 951.792,00 €
 Martín Montañés, Carlos
 Investigador/a del instituto: Gonzalo Asensio, Jesús Ángel

4.1.1.2. Proyectos financiados por entidades nacionales

Durante 2017, se ha investigado en el BIFI en 43 proyectos nacionales, de los que 10 han sido comenzados durante este año y están liderados por investigadores miembros del BIFI.

Proyectos con inicio en 2017 e IP miembro BIFI

Estructura, energética y simulación de conformaciones (parcialmente) desplegadas de las proteínas. Hacia modelos atómicos cuantitativos de la estabilidad de las proteínas
 Ministerio de Economía y Competitividad (BFU2016-78232-P)
 2017-2019
 205.700€
 Adrián Velázquez-Campoy / Javier Sancho

Reconocimiento molecular de GALNAC-TS sobre sus sustratos proteicos: diseño racional de péptidos inhibidores, implicaciones en enfermedades y relación con ALFA KLOTTHO, BFU2016-75633-P
 MINECO
 2017-2019
 266.200 €
 Ramón Hurtado-Guerrero

BFU2016-77671-P: Multifuncionalidad de las proteínas fur en cianobacterias: mecanismos alternativos de regulación del metabolismo y contribución a la formación de biofilms.
 MINECO.
 2017-2019
 169.400,00 €
 María Francisca Fillat Castejón

BIO2016-75183-P: Flavoenzimas: mecanismos y dianas moleculares, patologías y aplicaciones biotecnológicas.
 MINECO.
 2017-2019
 211.750,00 €
 María Milagros Medina Trullenque

CGL2016-79790-P: Evolución de caracteres biológicos y procesos de especiación en el género modelo *Brachypodium* (POACEAE) mediante análisis de genómica comparada y funcional.
 MINECO
 2017-2019
 242.000,00 €
 María Pilar Catalán Rodríguez

Diseño racional de glicomiméticos inhibidores de glicosiltransferasas
 MINECO
 2017-2019
 174.240 €
 Pedro Merino

Micromascotas
 Fecyt
 /01/2017-31/03/2018
 30.000€
 Jesús Clemente Gallardo

FCT-16-11204: DRONES Y MAZMORRAS.

Fecyt

01/01/2017-31/12/2017

10.000,00 €

Alfonso Tarancón Lafita

BFU2015-72190-EXP: ingeniería de genomas multiplex e iterativa (MIGE) EN *Mycobacterium*. Aplicación al desarrollo de herramientas para la búsqueda de nuevos antibióticos.

MINECO.

01/05/2017-30/04/2019

54.450,00

Jesús Ángel Gonzalo Asensio

DaPie: Diseño y fabricación personalizados automatizados en la nube

MINECO

01/09/2017-31/03/2018

8.318,00 €

Alfonso Tarancón Lafita

Proyectos con inicio en 2017 e IP no es miembro BIFI

ECO2016-74940-P: Modelos multirregionales y dinámicos aplicados al crecimiento económico, al cambio tecnológico y al medio ambiente.

MINECO

30/12/2016-29/12/2018

39.930,00 €

Investigadores/as responsables: Julio Sánchez Chóliz, María Rosa Duarte Pac

Investigador/a del BIFI: Isabel Almudí Higuera

Proyectos activos concedidos antes de 2017 e IP miembro BIFI

Equipo de fluorescencia de partícula única para el estudio de biomoléculas

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón y Ministerio de Economía y Competitividad (Proyecto de Infraestructuras Científico-Tecnológicas UNZA15-EE-2922)

2016-2018

323.049 €

Nunilo Cremades

Modulación de las características del músculo esquelético por la fosfoenolpiruvato carboxiquinasa

MINECO

01/01/2016 - 31/12/2018

145.200 €

Pascual López Buesa, J. Alberto Carrodegas

FIS2015-65078-C2-2-P: Computación avanzada en materiales y redes complejas.

MINECO. MINISTERIO DE ECONOMIA Y COMPETITIVIDAD

01/01/2016 - 31/12/2018 Duración: 3 años

71.148 €

Alfonso Tarancón Lafita; David Iñiguez Dieste

Nuevo equipamiento para el Laboratorio Avanzado de Cribado e Interacciones Moleculares de Aragón (LACRIMA)

Diputación General de Aragón y Ministerio de Economía y Competitividad (Proyecto de Infraestructuras Científico-Tecnológicas UNZA15-EE-3250)

2016-2018

386.872 €

Javier Sancho

Análisis de las interacciones proteínas/metabolitos en plasma mediante calorimetría: aplicación como método diagnóstico rápido y no invasivo para detección precoz y seguimiento de patologías tumorales digestivas (DIGCal)

Instituto Carlos III

DESDE: 01/01/2016-31/12/2018

98.615 €

Olga Abian Franco

Bases moleculares y determinantes estructurales de toxicidad celular de la agregación amiloide en la enfermedad de Parkinson" (BFU2015-64119-P)

MINECO

1/01/2016 - 31/12/2018

189.728 €

Nunilo Cremades

PRX16/00166. Estancia en The City University of NEW YORK (USA). Estancia desde 1 de septiembre de 2016 hasta 28 de febrero de 2017 proyecto: Transporte de ondas a través de medios desordenados: una colaboración teórica-experimental.

MINISTERIO DE EDUCACIÓN, CULTURA Y DEPORTE

01/09/2016-28/02/2017

19.309,00 €

Víctor Arturo Gopar Sánchez

Activación de NH₃ y CO₂ por complejos de rodio e iridio y su aplicación en el desarrollo de procesos catalíticos para la síntesis de compuestos de alto valor añadido

FONDOS FEDER - MINECO.

01/01/2016-31/12/2018

112.651 €

Victoriano Polo Ortiz

FIS2015-65078-C2-2-P: Computación avanzada en materiales y redes complejas.

MINECO

01/01/2016-31/12/2018

71.148,00 €

Alfonso Tarancón Lafita, David Iñiguez Dieste

Aplicaciones biomédicas de AS-48: una proteína con amplio espectro de actividad antimicrobiana

MINECO

01/01/2014 a 31/12/2017

157.300 €

José A. Ainsa

Ayuda adicional Ramón y Cajal RYC-2012-12068

MINECO.

01/12/2014-29/04/2018

40.000,00 €

Nunilo Cremades Casasín

Una ruta nueva en la búsqueda del funcional exacto de la teoría de funcionales de la densidad (FIS2014-61301-EXP).

MINECO

01/09/2015-31/12/2017

42350€

Alberto Castro

Flavoenzyme dependent systems: from action mechanisms to biotechnological and sanitary applications. BIO2013-42978-P

Enero 2014-Octubre 2017

137.000 €

Milagros Medina

MTM2014-53340-P: Resultados asintóticos e inferencia en modelos estocásticos

MINECO

01/01/2015-31/12/2017

42.108,00 €

Gerardo Sanz Saiz

Teoría de sistemas híbridos clásico-cuánticos: equilibrio, dinámicas y control

MINECO

01/01/2014-31/12/2017

38.000 €

Alberto Castro Barrigón

Convenio de colaboración entre la universidad de zaragoza y la fundación la caixa para el desarrollo del programa de becas de la caixa para estudios de doctorado en universidades españolas- dotación adicional para gastos complementarios

FUNDACION LA CAIXA

13/01/2014-12/01/2018

6.400,00 €

Pedro Latorre Muro

Proyectos activos concedidos antes de 2017 e IP no miembro BIFI

Métodos Geométricos en integrabilidad y teoría de control

MINECO

01/01/2016-31/12/2018

67.881 €

Eduardo Martínez Fernández

Investigador del BIFI: Jesús Jerónimo Clemente Gallardo

FCT-15-9845. Taller de construcción de impresoras 3D y taller avanzado de impresión 3D.

FECYT

01/01/2016- 31/12/2016

3.500,00 €

Luis Teodoro Oriol Langa

Investigador/a del instituto: Francisco Javier López Lorente

PI15/00317 analisis de las diferencias de is6110 entre los miembros del complejo *Mycobacterium tuberculosis* y el papel de su localización en el origen de replicación

FIS

01/01/2016-31/12/2018

74.415,00 €

Samper Blasco, Sofia Luisa

Investigador/a del instituto: Jesús Ángel

Gonzalo Asensio

4.1.1.3. Proyectos financiados por entidades autonómicas

En el 2017, se han desarrollado 7 proyectos con ayudas autonómicas, estando todos liderados por miembros del BIFI.

Proyectos con inicio en 2017 e IP miembro BIFI

VII National Conference BIFI 2017

D.G.A.

01/01/2017-14/11/2017

812,08 €

Javier Sancho Sanz

X reunión de micobacterias MYCOSPAIN-MYCOZAR (II reunión científica MYCONET)

D.G.A.

01/01/2017-14/11/2017

1.542,00 €

Santiago Ramón García

SAI para cpd del instituto bifi

D.G.A.. FONDOS FEDER

27/09/2017-31/12/2017

18.000,00 €

Director BIFI

New brunswick S41I incubador shaker

D.G.A.. FONDOS FEDER

17/10/2017-31/12/2017

11.500,00 €

Director BIFI

Sistema ÄKTA PRIME GE con software y armario refrigerado

D.G.A.. FONDOS FEDER

17/10/2017-31/12/2017

17.900,00 €

Director BIFI

Sistema de almacenamiento terciario para grandes cantidades de datos de respaldo en el cpd del bifi

D.G.A.. FONDOS FEDER

17/10/2017-31/12/2017

2.125,00 €

Director BIFI

Convenio de colaboración entre el gobierno de aragón y la universidad de zaragoza para el soporte del nodo de aragón en la red española de supercomputación

D.G.A..

2017

51635

D.G.A..

Director BIFI

4.1.1.4. Proyectos/ayudas cofinanciados por la Universidad de Zaragoza y otras entidades

Proyectos con inicio en 2017 IP miembro BIFI

Nuevas estrategias personalizadas para combatir enfermedades de origen infeccioso y de origen molecular (Consorcio de Tecnologías para la Salud)
 2017-2019
 18.000 €
 Campus Iberus
 Javier Sancho

BigData y computación en Ciencias de la salud (Consorcio de Tecnologías para la Salud)
 Campus Iberus
 2017-2019
 17.500 €
 Alfonso Tarancón

Ningún paciente de fenilketonuria sin un tratamiento eficaz
 CROWDFUNDING A TRAVÉS DE FECYT-PRECIPITA
 2017
 14.962 €
 Javier Sancho

BIFI VIII National Conference
 VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN. - CONGRESOS
 01/01/2017-31/12/2017
 682,00 €
 María Luisa Peleato Sánchez

Estudio de la interacción del Factor de Inducción de Apoptosis humano (hAIF) con sus parejas fisiológicas mediante espectroscopia de EPR.
 UZCUD2016-BIO-02:
 CENTRO UNIVERSITARIO DE LA DEFENSA DE ZARAGOZA. ACADEMIA MILITAR.
 Noviembre 2016- Septiembre 2017
 2.250 €
 Raquel Moreno Loshuertos

Biodegradación de lindano por cianobacterias: estudio de su potencial utilización en bioremediación, y bases moleculares para el desarrollo de un biosensor.
 Instituto de Estudios Altoaragoneses.
 2017
 3.000 €
 Emma Sevilla Miguel

Cooperación y generosidad
 Universidad de Zaragoza
 2017
 1.000
 José Alberto Molina Chueca

The share of paid and unpaid work between women and men
 Fondazione Giacomo Brodolini
 Julio 2017-Mayo 2018
 19.032,50 €

José Ignacio Giménez Nadal

Reparación de un espectrofotómetro uv-visible con software windows (Cary winuv)
 UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA
 01/01/2017-31/12/2017
 800,00 €
 María Luisa Peleato Sánchez,

Reparación de un sistema de alimentación ininterrumpida (SAI), MOD. GE LP33
 UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA
 01/01/2017-31/12/2017
 1.000,00 €
 David Iñiguez Dieste

Reparación de una centrifuga beckman AVANTI J-E
 UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA
 30/11/2017-31/12/2017
 1.900,00 €
 Javier Sancho Sanz

UZCUD2017-BIO-02: estudio de la interacción del factor de inducción de apoptosis humano (haif) con sus parejas fisiológicas mediante espectroscopia de epr y estudios de expresión celular.
 CENTRO UNIVERSITARIO DE LA DEFENSA DE ZARAGOZA ACADEMIA GENERAL MILITAR
 01/10/2017-30/09/2018
 1.500,00 €
 Raquel Moreno Loshuertos

UZ2017-BIO-02: estudio de factores genéticos y ambientales que modulan la formación y estabilidad de los supercomplejos respiratorios.
 VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN: APOYO
 19/06/2017-31/12/2017
 3.000,00 €
 Patricio Fernández Silva

UZ2017-BIO-01: Transcripcionales preliminares de m-tuberculosis en condiciones de persistencia inducida por los macrófagos.
 VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN: APOYO
 19/06/2017-31/12/2017
 3.000,00 €
 José Antonio Aínsa Claver, Santiago Ramón García

X Congreso Nacional de Micobacterias-MYCOSPAIN (II Reunión Científica MYCONET).
 VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN. - CONGRESOS
 22/09/2017-21/09/2018
 750,00 €
 Ramón García, Santiago

Proyectos con inicio antes de 2017 e IP es miembro BIFI

Convenio de colaboración entre el ayuntamiento de zaragoza y la universidad de zaragoza en relación con el programa ciencia ciudadana y visualización (CESAR)
 AYUNTAMIENTO DE ZARAGOZA
 19/05/2015-18/05/2019
 135.000,00 €
 Director BIFI

PTA-UZ-2015-BIO-03: Contratación de un técnico superior para el laboratorio de cribado del bifi.
 VI PERSONAL TECNICO UZ
 01/12/2015-31/01/2017
 9.072,00 €
 Javier Sancho Sanz

PTA-UZ-2015-CIE-04: Contratación de un diplomado para el centro de supercomputación de aragón (CESAR).
 VI PERSONAL TECNICO UZ
 01/12/2015-31/01/2017
 10.000,00 €
 Javier Sancho Sanz

Defining alpha-synuclein conformers responsible for PD phenotypes in mice
 De Investigación De Biocomputación y Física De Sistemas Complejos - Universidad de Zaragoza
 UNION EUROPEA
 01/05/2016-30/04/2017

55.000,00 €

Nunilo Cremades Casasin

UZCUD2016-BIO-02: Estudio de la interacción del factor de inducción de apoptosis humano (haif) con sus parejas fisiológicas mediante espectroscopía de epr y estudios de expresión celular.

CENTRO UNIVERSITARIO DE LA DEFENSA DE ZARAGOZA ACADEMIA GENERAL MILITAR

01/11/2016-30/09/2017

2.250,00 €

Raquel Moreno Loshuertos

PTAUZ-2016-BIO-04: Contratación de un diplomado universitario para el laboratorio avanzado de cribado molecular de aragón (LACRIMA)

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

01/12/2016-31/01/2018

8.500,00 €

Javier Sancho Sanz

PTAUZ-2016-CIE-03: Contratación de un diplomado universitario para el centro de supercomputación de aragón (CESAR).

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

01/12/2016-31/01/2018

9.000,00 €

Director BIFI

4.1.2. Proyectos participados o liderados por investigadores del BIFI financiados por empresas

Siete nuevos contratos con 7 entidades diferentes entidades en los que se ha colaborado a través de firma de contratos OTRI, han llevado a emprender los siguientes proyectos en el 2017.

Análisis y evaluación de la potencia antimicrobiana de una serie de compuestos suministrados por la empresa
 GLAXO SMITHKLINE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO, S.L
 01/01/2017 a 31/03/2017
 17.500 €
 José A. Aínsa

Extracción y caracterización de ácido Hialurónico a partir de tejidos porcinos
 AGROPECUARIA DEL PIRINEO, S.A.
 01/01/2017- 31/01/2018
 16.698,00 €
 Pascual Luis López Buesa

Caracterización de compuestos con actividad antituberculosis

GLAXO SMITHKLINE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO, S.L.

01/02/2017 a 31/01/2019

119.306 €

José A. Aínsa, Santiago Ramón García

Estudio de la patogenicidad de mutaciones encontradas en el gen ATAD3C en un paciente con síntomas de patología mitocondrial
 FUNDACIÓN MUTUA MADRILEÑA, CÓDIGO MMA17/01

12 Julio 2017 - 12 Julio 2020

130.000€

María Pilar Bayona Bafaluy

Characterisation of compounds active against mycobacteria
 SOCIEDADE TECNICO MEDICINAL S.A. - TECNIMEDE (PORTUGAL)
 07/02/2017 a 31/12/2017
 10.305 €
 José A. Aínsa

Contrato de Asesoría Puesta en marcha del desarrollo técnico fotocatalizador
 INGEOBRAS
 Octubre 2017-Diciembre 2017
 6.050 €
 Patricia Ferreira

Consultoría para uso de CPD en entorno de Computación en Cloud
 INSTITUTO TECNOLÓGICO DE ARAGON

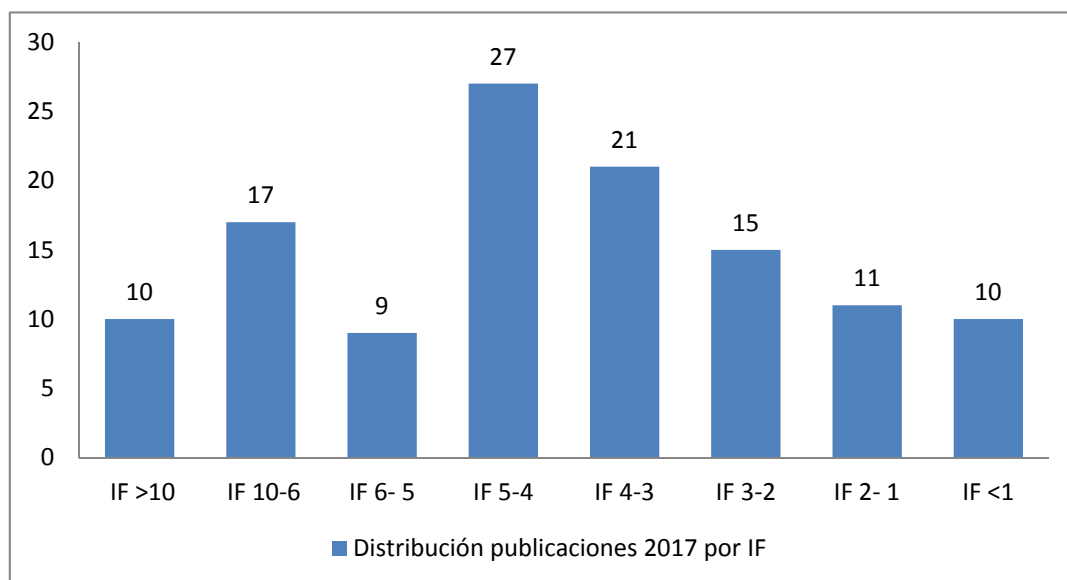
10/05/2017- Fecha de fin: 01/01/2018
 1.815,00 €
 David Iñiguez Dieste

Confidencial
 SCHNELL SOFTWARE, S.L.
 30/05/2017- 29/11/2017
 1.210,00 €
 Alfonso Tarancón Lafita

Confidencial
 INSTITUTO TECNOLÓGICO DE ARAGON
 09/10/2017 - 22/10/2018
 2.420,00 €
 David Iñiguez Dieste

4.2. Publicaciones

En 2017, los investigadores del BIFI han publicado 122 artículos científicos (Anexo 1). 120 de ellos (98,36%) en revistas con impacto JCR reconocido, 1 publicado en una revista de reciente aparición que no posee todavía su factor de impacto (IF) y otro en una revista no incluida hasta el momento en este grupo de publicaciones científicas. La gráfica siguiente muestra la distribución de dichos artículos por IF.



En la Tabla siguiente se especifica, para cada intervalo de IF, el número de publicaciones realizadas en revistas del primer cuartil (Q1) o del primer decil (D1).

IF	Nº publicaciones JCR	Nº publicaciones Q1	Nº publicaciones D1
IF >10	10	9	9
IF 10-6	17	17	11
IF 6-5	9	8	2
IF 5-4	27	26	2
IF 4-3	21	12	2
IF 3-2	15	7	2
IF 2-1	11	5	1
IF <1	10	0	0
Total	120	84	29

Un total de 27 publicaciones (22,5 % del total) aparecen en revistas con IF ≥ 6 . De ellas, 10 presentan un IF ≥ 10 . El 70 % de las publicaciones pertenecen al primer cuartil (Q1) y el 24,2 % al primer decil 1 (D1).

Nº publicaciones JCR:	120
IF>6:	27 (22,5 %)
Q1:	84 (70 %)
D1:	29 (24,2 %)

Durante el año 2017, la producción científica de los investigadores del BIFI también se ha visto reflejada en 4 contribuciones en libros de distintas áreas de investigación del instituto (Anexo 1).

4.3. Comunicaciones a congresos

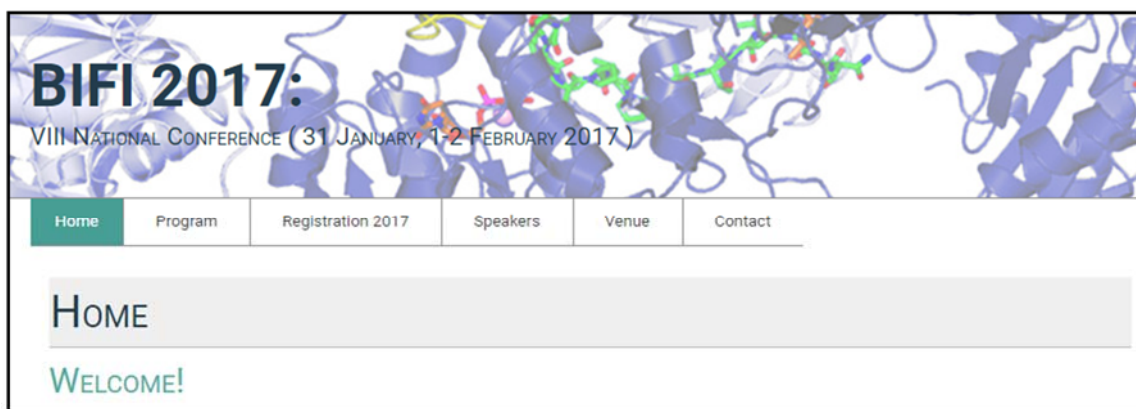
En 2017, los investigadores del BIFI han sido invitados y han participado en 38 conferencias nacionales e internacionales y con 69 comunicaciones (31 orales) en congresos nacionales e internacionales.

El Anexo 2 contiene la lista completa de las conferencias a las que han sido invitados miembros del BIFI y sus contribuciones en congresos.

4.4. Congresos, conferencias, cursos y jornadas organizados por el BIFI y Organización de conferencias en las que participan Investigadores de otros centros de investigación

El IUI BIFI ha organizado 7 eventos científicos durante 2017. En el Anexo 3 pueden verse el listado de los mismos con información sobre el título del evento, la duración, fecha y lugar de celebración. Destacan los siguientes:

- **Congreso Nacional del BIFI.** Asistieron más de 100 personas y se celebró en las instalaciones del IUI BIFI del 31 de enero al 2 de febrero.



Por otra parte, en 2017 se ha continuado con el ciclo de conferencias anual **BIFI Talks** que ofrece conferencias científicas de reconocidos expertos nacionales e internacionales concebidas para resultar atractivas a una audiencia científica multidisciplinar. El programa contenía las siguientes ponencias:

3 Marzo

Javier Buldú (Center for Biomedical Technology, U. Politécnica Madrid, U. Rey J. Carlos, Madrid).

Functional brain networks: Uses and misuses

6 Abril

Luis A. Campos (Centro Nacional de Biotecnología, CSIC, Madrid).

Tuning of a de novo ring oligomerization using structural and energetic information.

5 Mayo

Sergio Gómez (U. Rovira i Virgili, Tarragona).

Disease module identification by adjusting resolution in community detection algorithms.

2 Junio

Agustí Emperador (IRB, Barcelona).

Breaking the timescale limit in molecular dynamics simulations with a fast sampling implicit solvent model.

6 Octubre

Marcelo Guerin (CIC bioGUNE, Vizcaya).

Structural basis of phosphatidyl mannosides biosynthesis in mycobacteria: membrane enzymes working at the interface.

3 Noviembre

Josep Perelló (UB, Barcelona).

Participatory, collective and public experiments for gaining insights on human behavioral traits.

1 Diciembre

Silvia Hernández (INA, Unizar, Zaragoza).

Applying DNA nanotechnology to molecular sensing and medicine.

4.5. Patentes

Durante 2017, se ha solicitado 4 nuevas patentes:

1. Título: Compounds for treating Synucleinopathies (Compuesto A)
 Autores: Sancho Sanz, Javier; Ventura, Salvador; Conde Giménez, María
 N° solicitud: EP17158503.7 (Compuesto A)

Licencias: NO

2. Título: Compounds for treating Synucleinopathies (Compuesto D)
Autores: Ventura, Salvador; Sancho Sanz, Javier; Conde Giménez, María
Nº solicitud: EP17158468.3 (Compuesto D)
Licencias: NO
3. Título: Compounds for treating Synucleinopathies (Compuesto G)
Autores: Sancho Sanz, Javier; Conde Giménez, María; Ventura, Salvador
Nº solicitud: EP17158509.4 (Compuesto G)
Licencias: NO
4. Título: Enzymatic composition and Enzymatic process for the production of 2,5
Furandicarboxylic Acid from 5-Methoxymethylfurfural using said Enzymatic composition
Autores: Ferreira Neila, Patricia; Martinez Ferrer, Angel Tomas
Nº solicitud: P201730805
Licencias: NO

Se ha mantenido la explotación de dos de las solicitadas en años anteriores.

4.6. Empresas SPIN-OFF

No se han creado empresas spin off durante el 2017.

5. Formación

5.1. Tesis dirigidas leídas, trabajos fin de grado, trabajos fin de máster y trabajos académicamente dirigidos en 2017

Durante 2017 se han defendido 10 Tesis Doctorales, así como 8 Trabajos Fin de Máster y 35 Trabajos Fin de Grado.

Tesis Doctorales defendidas

Título: Biophysical characterization and identification of bioactive compounds against the pharmacological target MeCP2 and evaluation of drug nanocarriers

Doctorando: Rafael Clavería Gimeno

Director/es: Adrián Velázquez Campoy, Olga Abián Franco

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 27/11/2017

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Director/es: Carlos Martín, Jesús Gonzalo Asensio y Ainhoa Arbués Arribas

Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 16-12-2016

Calificación: Sobresaliente CUM LAUDE

Título: Caracterización bioquímica y estructural de la flavodoxina de *Streptococcus pneumoniae* cepa TIGR4

Doctorando: Ángela Rodríguez Cárdenas

Director/es: Javier Sancho y Ramón Hurtado-Guerrero

Universidad: Zaragoza

Fecha de defensa: 26 de junio de 2017

Calificación: CUM LAUDE

Título: Activación del enlace N.H de amoníaco y funcionalización mediada por precursores organometálicos de rodio e iridio: estudios teóricos y experimentales.

Doctorando: María Pilar Betoré De Ulierte

Director/es: Polo Ortiz, Victoriano y Miguel Ángel Casado Lacabra

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 27/01/2017

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Título: Estabilización racional de la apoflavodoxina de Anabaena PCC 7119 y estudio de la relevancia de su intermediario térmico

DOCTORANDO: Emilio Lamazares

UNIVERSIDAD: Zaragoza

Fecha: 2017

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Título: Non-linear Models on Complex Networked Systems: From Synchronization Phenomena to Activity Patterns and Cascades

Doctorando: Pablo A. Piedrahita Salom

Director/es: Yamir Moreno, Javier Borge Holthoefer

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 12 de septiembre 2017

Calificación: Sobresaliente Cum Laude.

Título: Nuevas oxidorreductasas GMC de hongos ligninolíticos: Screening genómico, catálisis y potencial biotecnológico

Doctorando: Juan Rogelio Carro Aramburu

Director/es: Ángel T. Martínez y Patricia Ferreira

Universidad: Complutense

Fecha de defensa: 10 de mayo de 2017

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Título: Open quantum systems: geometric description, dynamics and control

Doctorando: Jorge A. Jover Galtier

Director/es: José F. Cariñena y Jesús Clemente Gallardo

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 03/07/2017

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Título: A rationale to construct a multivalent vaccine: Heterologous antigen expression in MTBVAC

Doctorando: Esther Broset Blasco

Director/es: Carlos Martín, Jesús Gonzalo Asensio

Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 2017

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Título: Intervención a través de la estimulación cognitiva en mayores con deterioro cognitivo o demencia leve en atención primaria.

Doctorando: Isabel Gómez Soria

Director/es: Carmen Muro y Fernando Plo

Universidad: Zaragoza

Fecha de defensa: 02/03/2017

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Título: In deep study of new tuberculosis vaccine candidates based on phoP and fadD26 mutations

Doctorando: Carmen Arnal Bordetas

Trabajos fin de máster

Título: Prototipo de aplicación bioinformática para estabilizar proteínas de manera racional
Estudiante: Héctor García Cebollada
Director/es: Javier Sancho Sanz, Adrián Velázquez Campoy
Universidad: Universidad de Zaragoza
Fecha de defensa: Octubre 2017
Calificación: Matrícula de honor

Título: Identificación de compuestos inhibidores dirigidos contra la flavodoxina de *Streptococcus pneumoniae*
Estudiante: Sara Prieto Rodríguez
Director/es: Javier Sancho Sanz, Adrián Velázquez Campoy
Universidad: Universidad de Zaragoza
Fecha de defensa: Diciembre 2017
Calificación: Notable

Título: Mutaciones en el factor de inducción de apoptosis humano relacionadas con enfermedades neurológicas (síndromes de Charcot Marie-Tooth y Chowchock). Caracterización bioquímica.
Estudiante: Yasmina Coman
Director/es: Patricia Ferreira y Milagros Medina
Universidad: Universidad de Zaragoza.
Fecha de defensa: Julio 2017
Calificación: Notable

Título: Bases moleculares de la interacción del factor de inducción de apoptosis humano (hAIF) y la proteína mitocondrial CHCHD4
Estudiante: Soraya Hernández Hatibi
Director/es: Raquel Moreno Loshuertos/Patricia Ferreira Neila
Universidad: Universidad de Zaragoza
Fecha de defensa: Septiembre 2017
Calificación: Sobresaliente

Título: Estudio del papel de las cisteínas del regulador transcripcional FurB de cianobacterias
Estudiante: Isabel Valero Rubira
Director/es: Emma Sevilla Miguel y María F. Fillat Castejón
Universidad: Zaragoza
Fecha de defensa: Julio 2017
Calificación: Sobresaliente

Título: Myco-MIGE: Ingeniería de Genomas Multiplex e Iterativa en *Mycobacterium*
Estudiante: Juan Calvet Seral
Director/es: Jesús Gonzalo Asensio
Universidad: Zaragoza
Fecha de defensa: Septiembre 2017
Calificación: Sobresaliente

Título: Translocación de polímeros biológicos a través de nanoporos
Estudiante: Guillermo Díez Señorans
Director/es: Fernando Falo y Alessandro Fiasconaro
Universidad: Zaragoza
Fecha de defensa: Diciembre de 2017
Calificación: Matrícula de Honor

Título: Modelización Matemática de sistemas biológicos.
Estudiante: Pablo Javier Blasco Hernández
Director/es: Pierpaolo Bruscolini y Fernando Falo
Universidad: Zaragoza
Fecha de defensa: Diciembre de 2017
Calificación: Sobresaliente.

Trabajos fin de grado

Título: Estudio del mecanismo de reconocimiento de los TSRs de tipo 1 y 2 por la proteína O-fucosiltransferasa 2
 Estudiante: María Bernad

Director/es: Ramón Hurtado-Guerrero y Matilde de las Rivas
 Universidad: Zaragoza
 Fecha de defensa: Julio
 Calificación: Sobresaliente

Título: Cristalización de proteínas redox y predicción estructural de la FAD sintetasa humana
 Estudiante: Víctor Taleb Seral

Director/es: Marta Martínez Júlvez y Ana Isabel Gracia Lostao
 Universidad: Universidad de Zaragoza.
 Fecha de defensa: Febrero 2017
 Calificación: Notable

Título: Caracterización cinética de la riboflavina quinasa humana y evaluación del efecto en su actividad de potenciales antimicrobianos
 Estudiante: Sergio Fernandez Ayala

Director/es: Milagros Medina y Ernesto Anoz
 Universidad: Universidad de Zaragoza.
 Fecha de defensa: Julio 2017
 Calificación: Notable

Título: Caracterización Bioquímica de la mutación G308E del Apoptosis humano (hAIF)
 Estudiante: Laura Aguado Álvaro

Director/es: Patricia Ferreira y Raquel Moreno Loshuertos
 Universidad: Universidad de Zaragoza.
 Fecha de defensa: Julio 2017
 Calificación: Sobresaliente

Título: Estudio del efecto inhibitorio de algunos compuestos químicos en la actividad reductasa de flavoenzimas de organismos patógenos
 Estudiante: Daniel Pérez Amigot

Director/es: Marta Martínez Júlvez
 Universidad: Universidad de Zaragoza.
 Fecha de defensa: Julio 2017
 Calificación: 9, Sobresaliente

Título: Caracterización funcional de AIFM3 (Apoptosis-inducing factor mitochondrion-associated 3) mediante inactivación del gen por la técnica CRISPR-Cas9 y sobreexpresión de la proteína en bacterias y células eucariotas.
 Estudiante: Nerea Novo Huerta

Director/es: Jose Alberto Carrodegua y Milagros Medina
 Universidad: Universidad de Zaragoza.
 Fecha de defensa: Septiembre 2017
 Calificación: Notable

Título: Seguimiento de los cambios conformacionales del dominio del Factor de Inducción del Apoptosis humano (hAIF) con marcaje selectivo de espín y espectroscopia de EPR
 Estudiante: Nikol Paulina Zeballos Lema

Director/es: Patricia Ferreira e Inés Rubio García

Universidad: Universidad de Zaragoza.

Fecha de defensa: Septiembre 2017

Calificación: Notable

Título: Implicaciones de algunos residuos del centro activo del Factor de Inducción del Apoptosis humano (hAIF) en sus actividades celulares
 Estudiante: Julio Rodrigo Rodrigo

Director/es: Patricia Ferreira y Raquel Moreno Loshuertos
 Universidad: Universidad de Zaragoza.

Fecha de defensa: Septiembre 2017

Calificación: Notable

Título: Estudio del efecto de mutaciones en el centro activo del Factor de Inducción del Apoptosis humano (hAIF)
 Estudiante: Mikel Marín Baquero

Director/es: Patricia Ferreira y Raquel Moreno Loshuertos
 Universidad: Universidad de Zaragoza.

Fecha de defensa: Septiembre 2017

Calificación: Matrícula Honor

Título: Estudio del efecto inhibitorio de algunos compuestos químicos en la actividad reductasa de la ferredoxin NADP⁺ reductasa del patógeno Leptospira interrogans
 Estudiante: María Marco Clavero

Director/es: Marta Martínez Júlvez y Milagros Medina
 Universidad: Universidad de Zaragoza.

Fecha de defensa: Diciembre 2017

Calificación: Notable

Título: Caracterización bioquímica de la mutación G308E del factor de inducción de apoptosis humano implicada en procesos neurodegenerativos
 Estudiante: Laura Aguado Álvaro

Director/es: Raquel Moreno Loshuertos/Patricia Ferreira Neila
 Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: Julio 2017

Calificación: Sobresaliente

Título: Tratamiento nutricional en niños con defecto congénito de glicosilación
 Estudiante: Rucadén de León Cabrera

Director/es: Raquel Moreno Loshuertos
 Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: Septiembre 2017

Calificación: Aprobado

Título: Expresión recombinante, purificación y evaluación de la actividad biológica de proteínas bacterianas de interés biotecnológico
 Estudiante: Jordan Moran Martínez

Director/es: Andrés González y María F. Fillat
 Universidad: Zaragoza

Fecha de defensa: Julio 2017

Calificación: Sobresaliente

Título: Genómica Nutricional y Obesidad
 Estudiante: González González, Lincoln Gerardo
 Director/es: Patricia Meade Huerta
 Universidad: Universidad de Zaragoza
 Fecha de defensa: 06/07/2017
 Calificación: Sobresaliente

Título: Alteraciones en el perfil genético y el desarrollo de dislipemias asociadas al colesterol
 Estudiante: Perez Naharro, Laura Raquel
 Director/es: Patricia Meade Huerta
 Universidad: Universidad de Zaragoza
 Fecha de defensa: 06/07/2017
 Calificación: Notable

Título: El consumo de ácido fólico y la disminución del riesgo de cáncer Colorrectal
 Estudiante: Ghellal Seguí, Gabriel
 Director/es: Patricia Meade Huerta
 Universidad: Universidad de Zaragoza
 Fecha de defensa: 18/12/2017
 Calificación: Aprobado

Título: Comparación de renotipos de pacientes con mutaciones en FBXL4
 Estudiante: Ríos Ballestín, Guillermo
 Director/es: María Pilar Bayona Bafaluy
 Universidad: Universidad Zaragoza
 Fecha de defensa: 05/07/2017
 Calificación: Notable

Título: Teorías de espectroscopias de fuerzas
 Estudiante: Luis Esteban Andaluz
 Director/es: Fernando Faló y Juan José Mazo
 Universidad: Zaragoza
 Fecha de defensa: Julio de 2017
 Calificación: Matrícula de Honor

Título: Estudio computacional de los mecanismos moleculares en reacciones de hidroaminación catalizada por complejos organometálicos
 Estudiante: Larraz Tejero, Alberto David
 Director/es: Polo Ortiz, Victoriano y Gallardo Jiménez, María Asunción
 Universidad: Universidad de Zaragoza
 Fecha de defensa: 02/10/2017
 Calificación: Notable

Título: Formulación geométrica de la Mecánica Cuántica y Aplicaciones
 Estudiante: Carlos Bouthelier Madre
 Director/es: Jesús Clemente Gallardo
 Universidad: Universidad de Zaragoza
 Fecha de defensa: 13/07/2017
 Calificación: Matrícula de honor

Título: Desigualdad de salarios y género
 Estudiante: Isabel Rodríguez Guembe
 Director/es: José Ignacio Giménez Nadal
 Universidad: Zaragoza
 Fecha de defensa: 11/07/2017
 Calificación: Notable

Título: Factores determinantes sobre los sentimientos de los trabajadores durante el trabajo
 Estudiante: Cynthia González Díaz
 Director/es: José Ignacio Giménez Nadal

Universidad: Zaragoza
 Fecha de defensa: 11/07/2017
 Calificación: Aprobado

Título: Efectos y desigualdad en España como consecuencia de la crisis económica
 Estudiante: Alejandro Garrido Muñoz
 Director/es: José Ignacio Giménez Nadal
 Universidad: Zaragoza
 Fecha de defensa: 12/07/2017
 Calificación: Aprobado

Título: El mercado laboral y el uso del tiempo
 Estudiante: Irene Armañac Vivas
 Director/es: José Ignacio Giménez Nadal
 Universidad: Zaragoza
 Fecha de defensa: 12/07/2017
 Calificación: Notable

Título: Análisis de la brecha salarial de género en España
 Estudiante: Alberto Sevil Marco
 Director/es: José Ignacio Giménez Nadal
 Universidad: Zaragoza
 Fecha de defensa: 13/07/2017
 Calificación: Notable

Título: Estudio de la Desigualdad en España durante la Crisis Económica
 Estudiante: Ignacio González-Spinola Royo
 Director/es: José Ignacio Giménez Nadal
 Universidad: Zaragoza
 Fecha de defensa: 13/07/2017
 Calificación: Aprobado

Título: Salarios y género
 Estudiante: Patricia Ibarz Staun
 Director/es: José Ignacio Giménez Nadal
 Universidad: Zaragoza
 Fecha de defensa: 17/11/2017
 Calificación: Notable

Título: Estudio de la degradación de isómeros de lindano en muestras complejas procedentes del vertedero de Bailín
 Estudiante: Sara Abizanda
 Director/es: M^a Luisa Peleato
 Universidad: Zaragoza
 Fecha de defensa: 09/2017
 Calificación: Notable

Título: Caracterización funcional de la AIFM3 (Apoptosis inducing factor mitochondrion-associated 3) mediante inactivación del gen por la técnica CRISPR-Cas 9 y la sobreexpresión de la proteína en bacterias y células eucariotas.
 Estudiante: Nerea Novo Huerta
 Codirector/a tesis: Medina Trullenque, María Milagros
 Universidad: Zaragoza
 Fecha de defensa: 27/09/2017
 Calificación obtenida: Notable

Título: Aislamiento y determinación estructural de compuestos con actividad antitumoral en muestras de IBC.
 Estudiante: Isabel Bascuas Jiménez De Bagüés

Codirector/a tesis: Tejero López, Tomás
 Universidad de Zaragoza
 Fecha de defensa: 14/07/2017
 Calificación obtenida: Sobresaliente

Título: Papel en la regulación del metabolismo intermediario de la isoforma citosólica de la fosfoenolpiruvato carboxiquinasa (PEPCK) mediante edición genómica con CRISPR- Cas9.
 Estudiante: Alba Beltrán Mcandrew
 Codirector/a tesis: López Buesa, Pascual Luis
 Universidad de Zaragoza
 Fecha de defensa: 13/07/2017
 Calificación obtenida: Sobresaliente

Título: Estudio del papel en la proliferación celular y en el metabolismo de la isoforma mitocondrial de

Título: Nuevas estrategias emprendedoras: reinventando la empresa familiar Grupo Hierros Alfonso
 Estudiante: David Asensio Apellaniz
 Director/es: Jose Alberto Molina Chueca
 Entidad de realización: Universidad de Zaragoza
 Fecha de defensa: 15/11/2017
 Calificación obtenida: Aprobado

la fosfoenolpiruvato carboxiquinasa (PEPCK-M) mediante edición genómica con CRISPR-Cas9.
 Estudiante: Guayente Latorre Pastor
 Codirector/a tesis: Latorre Muro, Pedro
 Entidad de realización: Universidad de Zaragoza
 Fecha de defensa: 13/07/2017
 Calificación obtenida: Notable

Título: Funcionalidad de mutantes múltiples de cisteína de la proteína Fur de la bacteria patógena *Clostridium difficile*
 Estudiante: Álvaro Sejas Martínez
 Director/es: Ángela Fernández-Otal y Andrés González (Ponente M^a Teresa Bes)
 Universidad: Zaragoza
 Fecha de defensa: Julio 2017
 Calificación: Sobresaliente MH

Título: El emprendimiento sénior: Marco Conceptual y Evidencia Empírica
 Estudiante: Rebeca Sanchez Gracia
 Director/es: Jose Alberto Molina Chueca
 Entidad de realización: Universidad de Zaragoza
 Fecha de defensa: 14/11/2017
 Calificación obtenida: Matrícula de honor

5.2. Becas de iniciación a la investigación

Título proyecto: Bases moleculares y determinantes estructurales de toxicidad celular de la agregación amiloide en la enfermedad de Parkinson.
 Beneficiario: Pablo Gracia González
 Entidad financiadora: MINECO
 Fecha de comienzo: Mayo 2017

Título proyecto: Purificación y caracterización funcional de mutantes del regulador FurB de *Anabaena*
 Beneficiario: Eduardo Moreno
 Entidad financiadora: MINISTERIO DE EDUCACIÓN, CULTURA Y DEPORTE
 Fecha de comienzo: Junio 2017-septiembre 2017

Título proyecto: Formulación geométrica de la Mecánica Cuántica y sus aplicaciones
 Beneficiario: Emanuel Cristian Boghiu
 Entidad financiadora: Min. Educación, Cultura y Deporte
 Fecha de comienzo: Octubre 2017

5.3. Cursos impartidos

Título: School on Kinetics and Dynamics of Chemical Reactions
 Duración: 5 días
 Tipo de actividad: Curso especializado
 Ámbito: Internacional
 Organizada por: ZCAM
 Organizadores: Alberto Castro.
 Fecha y Lugar de celebración: 20-24 de Marzo, ZCAM.

Título: School on Quantum and Mixed Quantum Classical Dynamics Simulations for the Study of Photo-Initiated Processes
 Duración: 5 días
 Tipo de actividad: Curso especializado
 Ámbito: Internacional
 Organizada por: ZCAM
 Organizadores: Alberto Castro.
 Fecha y Lugar de celebración: 27-31 de Marzo, ZCAM

Título: School on Theoretical Solid State Chemistry: Theory, Modeling and Simulation
Duración: 5 días
Tipo de actividad: Curso especializado
Ámbito: Internacional
Organizada por: ZCAM
Organizadores: Alberto Castro.
Fecha y Lugar de celebración: 8-12 de Mayo, ZCAM

Título: School on Computational Biochemistry
Duración: 5 días
Tipo de actividad: Curso especializado
Ámbito: Internacional
Organizada por: ZCAM
Organizadores: Alberto Castro.
Fecha y Lugar de celebración: 15-19 de Mayo, ZCAM

Título: WaterSpain
Duración: 2 días
Tipo de actividad: Curso especializado
Ámbito: Internacional
Organizada por: ZCAM
Organizadores: Alberto Castro.
Fecha y Lugar de celebración: 6-7 de Julio, ZCAM

Título: Theoretical Methods in Quantum Chemistry
Duración: 5 días
Tipo de actividad: Curso especializado
Ámbito: Internacional
Organizada por: ZCAM
Organizadores: Alberto Castro.
Fecha y Lugar de celebración: 2-6 de Octubre, ZCAM.

5.4. Máster de Biotecnología Cuantitativa



Quantitative Biotechnology

La nueva titulación relacionada con las líneas de investigación que desarrolla el Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) comenzó su edición en octubre de 2017 con 13 alumnos inscritos.

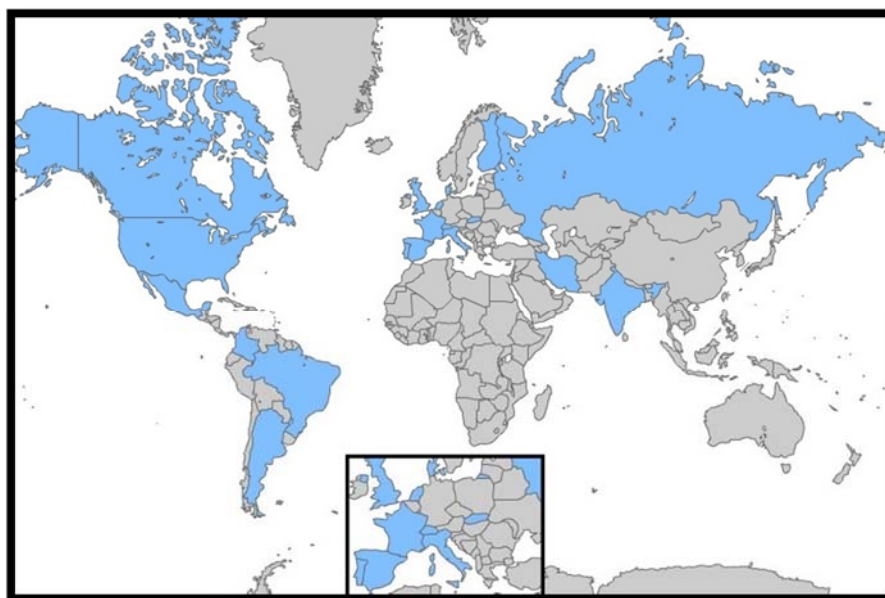
El título está orientado al ámbito de la investigación biotecnológica y al sector empresarial, dirigido a estudiantes y perfiles profesionales diversos. En concreto, los títulos de acceso al máster en Biotecnología Cuantitativa son Grado o Licenciatura en Biotecnología, Bioquímica, Física, Biología, Química, Farmacia, Medicina, Veterinaria y Ciencia y Tecnología de los Alimentos. El master tiene formato presencial, se imparte en inglés con el objetivo de hacer llegar a los titulados una oferta docente casi única en el contexto nacional y bastante singular en el contexto internacional. La combinación transversal de enfoques biotecnológicos basados en la modelización y el experimento orientados a comprender y perfeccionar el funcionamiento de la empresa biotecnológica es de gran novedad.

6. Proyección Internacional

6.1. Colaboraciones externas

6.1.1. Con centros extranjeros

Los investigadores del BIFI han establecido o mantenido durante 2017 colaboraciones con 42 centros de investigación (ver anexo 4) repartidos por 18 países.



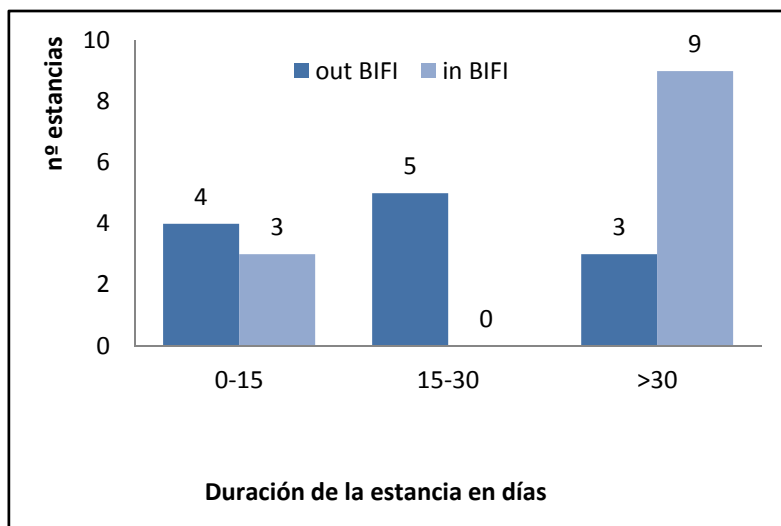
6.1.2. Con centros españoles

Dentro de España, se mantienen colaboraciones activas con numerosos centros de investigación añadiendo 8 nuevas colaboraciones.



6.2. Estancias en otros centros de investigación

Los investigadores del BIFI han realizado 12 estancias de investigación en centros extranjeros y 12 investigadores extranjeros han realizado estancias de investigación en el BIFI. El detalle de las estancias y los miembros del BIFI implicados aparecen en el Anexo 5. En la gráfica siguiente puede verse la distribución de las estancias por su duración.



out BIFI: Estancias de investigadores del BIFI en otros centros
in BIFI: Estancias de investigadores de otros centros en el BIFI

7. Interacción con la sociedad

El BIFI utiliza diversos canales para interactuar con la Sociedad. Durante 2017 se han realizado numerosas actividades en el contexto regional, nacional e internacional que han contribuido a ampliar la visibilidad del instituto y su actividad investigadora.

Prensa, Web y social media

Las actividades del BIFI, anticipadas mediante notas de prensa, han sido recogidas en importantes medios de comunicación. Por ejemplo:

- "Huellas de la Residencia en la Cultura Española: Miguel Catalán Sañudo (1894-1957), descubridor de los multipletes del manganeso". Ponencia invitada. Coloquio y mesa redonda: Buñuel en Residencia. Escuela de Doctorado, Universidad de Zaragoza. Zaragoza. 10/11/2017.
- "La Universidad de Zaragoza lidera un estudio para la mejora de las variedades de trigo para alimentación". Prensa Universidad de Zaragoza. 19/12/2017.
- "Equipos europeos estudian plantas modelo para la mejora de las variedades de trigo". Diario del Altoaragón. 21/12/2017.
- Aragón Digital Innovation Hub impulsa una jornada para empresas interesadas en la Industria 4.0. 20 Minutos. 8/12/2017
- Puesta en marcha del Centro de Innovación Digital. 3er Milenio. Heraldo de Aragón. 1/11/2017
- Hacia un tratamiento personalizado para las enfermedades raras. 3er Milenio. Heraldo de Aragón. 26/10/2017
- ¿Tienes un proyecto? Cuéntaselo a César. 3er Milenio. Heraldo de Aragón. 6/10/2017
- El investigador de biotecnología Adrián Velázquez Campoy, nombrado miembro de la Real Academia Nacional de Medicina. Aragón Digital. 9/7/2017
- La Real Academia de Medicina nombra académico a Adrián Velázquez. Heraldo de Aragón. 9/7/2017
- Conoce las micromascotas. 3er Milenio. Heraldo de Aragón. 16/06/2017
- Desvelar el anonimato frena las noticias falsas en las redes sociales. Heraldo de Aragón. 2/5/2017
- Los laboratorios Cesar quieren acercar la ciencia a los ciudadanos. Heraldo de Aragón. 6/04/2017
- El proyecto CESAR sitúa a Etopia a la vanguardia de la ciencia ciudadana en supercomputación. EuropaPress. 6/4/2017





Congreso anual de BIFI

Del 31 enero al 2 de febrero de 2017, tuvo lugar el Congreso Nacional del BIFI. El programa incluyó sesiones plenarias y conferencias impartidas por prestigiosos investigadores invitados y del propio instituto, así como charlas de nuestros estudiantes predoctorales, con el doble objetivo de dar visibilidad a las líneas de investigación del Instituto y potenciar colaboraciones futuras. Se contó con la participación de más de 100 investigadores y profesores universitarios.

Eventos y charlas de divulgación científica

- Exposición de maquetas del proyecto Drones y Mazmorras en Capitanía General. 14 diciembre 2017 al 14 de enero de 2018, coordinada por Alfonso Tarancón.



- Participación en el festival internacional de divulgación científica 'Pint of Science 2017' con la charla ¿Qué hace un físico estudiando twitter? impartida por Alberto Aleta.



- Ciencia contada con pasión, Paraninfo Universidad de Zaragoza, 22/03/2017, Jesús Clemente.





- Participación en las I Jornadas IEEE-Days 2017, Eina, Zaragoza, 22/02/2017, Jesús Clemente.

Visitas de estudiantes y colaboraciones de formación

- 1er Curso Drones y Mazmorras: Planificación de la actividad y formación en Nuevas Tecnologías y Patrimonio. Febrero 2017. Alfonso Tarancón.
- 2º Curso Drones y Mazorras. Taller de Fabricación y Montaje de exposición. Septiembre de 2017. Alfonso Tarancón.



- Puesta en marcha del laboratorio de Economía Experimental Nectunt Lab. En el laboratorio, ubicado en el edificio del instituto BIFI, se realizan experimentos socio-económicos y consta de más de 6000 voluntarios registrados. Responsable del laboratorio: Yamir Moreno.



- I Reunión Anual GBsC (BIFI, UNIZAR) Unidad Asociada al CSIC. (Grupo Bioquímica, Biofísica, Biología Computacional). Organizada por I Yruela y P. Ferreira



- XI FORO DE SANIDAD “La Medicina de Precisión en el Sistema de Salud”. Cortes de Aragón, 2 de octubre de 2017 . Participación en mesa redonda. Javier Sancho.



- Reunión de la Asociación PKU y OTM Navarra, Izkue 21-22 de octubre de 2017. Charla Chaperonas para la Fenilcetonuria. Javier Sancho.
- Charla impartida: "The human apoptosis inducing factor: key molecular determinants in cellular respiration, programmed cell death and neurodegenerative disorders". Università degli Studi di Milano. Milagros Medina. October 2017
- Semana de Inmersión en Ciencias 2017, Facultad de Ciencias. Universidad de Zaragoza. 12-16 de junio 2017. Patricia Ferreira
- Visita institucional de dos delegaciones chinas, en concreto de la Universidad de Hubei y de la universidad de Nanjing (noviembre). Las delegaciones visitaron las instalaciones del Instituto Universitario de Investigación de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) además del resto de institutos.



Concursos

- II Convocatoria proyectos Cesar-Etopia, septiembre- octubre de 2017 (8 proyectos seleccionados)

Transferencia a empresas

En 2017 se ha mantenido la colaboración con *agrupaciones empresariales nacionales* como Tecnara, Tecnalia, Innovalia, Arahealth, IDIA planteando propuestas de colaboración con empresas tales como el proyecto DaPie en colaboración con Ingecon, Tecnara y Podoactiva.

El grupo de computación ha participado en las reuniones RESxPyme, red de trabajo dentro de la Red Española de Supercomputación para fomentar el uso de las tecnologías HPC entre las Pymes.

También se mantienen las colaboraciones con Plataformas Tecnológicas Nacionales: MANU-KET (Plataforma Española de Fabricación Avanzada), PLANETIC.

A nivel internacional se ha colaborado con la PPP Factories of the Future, difundiendo las oportunidades de financiación a través de la colaboración con empresas como Kliux, Nablodot.

Eventos con empresas

- Participación en Foro Transfiere. Participación en Mesa redonda para exponer las posibilidades de colaboración con RESxPYME (HPC por parte de las empresas). Málaga, Febrero 2017.
- Asistencia a evento Digital Innovation Hubs organizado por el Ministerio de Economía y Competitividad. Madrid, Mayo 2017.

- Asistencia la presentación del programa de financiación Retos Colaboración con empresas del Ministerio de Economía y Competitividad. Madrid, Septiembre 2017.
- Asistencia al evento VIVE Tecnara 2017 organizado por el cluster tecnológico de Aragón. Zaragoza, Octubre 2017.
- Asistencia al evento Jornada Aragón DIH: "Programas de financiación europea y servicios de innovación" en ITAINNOVA, Zaragoza, Diciembre 2017
- Asistencia a reunión Grupo de Trabajo Industria 4.0 organizada con VEA Global. Zaragoza, Mayo 2017 y Junio 2017
- Participación en el evento Digital Innovation Hubs: Key towards broad Digital Transformation of European industry. Madrid, Septiembre 2017.

Reuniones con empresas

Se han mantenido reuniones con entidades de diferente índole con las que se plantean colaboraciones: Inycom -Inycom Biotech, Codeoscopic, IBERCAJA, Corporación MONDRAGON, IACS, El Corte Inglés, IECISA, Nablado, Kliux, Tecnalia, Innovalia, Schnell Software, Carsa, IK4, AIMEN, ITAINNOVA, Podoactiva, CloudSME UG, Electrónica Cerler, Quirón, Indra, IngeObras, PCTAD, Quantitative Genomic Medicine Laboratory SL, BSIM2 Biomolecular Simulations LDA, SOM Innovation Biotech SL, SmartLigs Bioinformática, Telnet, Zeu Biotech, SL.

Otros:

En 2017 se han lanzado dos proyectos de crowdfunding a través de la plataforma Precipita de FECYT.

NanoFungi: tratamientos antifúngicos alternativos (Ramón Hurtado). El objetivo es el descubrimiento de fármacos antifúngicos alternativos a los existentes, contra los que *Aspergillus fumigatus* (una de los hongos más agresivos en inmunodeprimidos) ya es resistente.



Ningún paciente de fenilcetonuria sin un tratamiento eficaz (Javier Sancho): El objetivo principal del proyecto es evaluar la eficacia de nuevas chaperonas farmacológicas (compuestos estabilizadores) para el tratamiento de pacientes con fenilcetonuria que no responden al fármaco Kuvan.



ANEXOS

ANEXO 1. Publicaciones en revistas científicas

	IF	Q	D
1. Fusco G, Chen SW, Williamson PTF, Cascella R, Perni M, Jarvis JA, Cecchi C, Vendruscolo M, Chiti F, Cremades N, Ying L, Dobson CM & De Simone A. Structural basis of membrane disruption and cellular toxicity by alpha-synuclein oligomers. <i>Science</i> , 358(6369):1440-1443. 2017.	37,205	1	1
2. Anastassopoulos V, Aune S, Barth K, Belov A, Bräuninger H, Cantatore G, Carmona JM, Castel JF, Cetin SA, Christensen F, Collar JI, Dafni T, Davenport M, Decker TA, Dermenev A, Desch K, Eleftheriadis C, Fanourakis G, Ferrer-Ribas, E, Fischer H, García JA, Gardikiotis A, Garza JG, Gazis EN, Geralis T, Giomataris I, Gninenko S, Hailey CJ, Hasinoff MD, Hoffmann DHH, Iguaz FJ, Irastorza IG, Jakobsen A, Jacoby J, Jakovcic K, Kaminski J, Karuza M, Kralj N, Krcmar M, Kostoglou S, Krieger Ch, Lakic B, Laurent JM, Liolios A, Ljubcic A, Luzón G, Maroudas M, Miceli L, Neff S, Ortega I, Papaevangelou T, Paraschou K, Pivovarov MJ, Raffelt G, Rosu M, Ruz J, Chóliz ER, Savvidis I, Schmidt S, Semertzidis YK, Solanki SK, Stewart L, Vafeiadis T, Vogel JK, Yildiz SC, Zioutas K. New CAST limit on the axion-photon interaction. <i>Nature Physics</i> , 6 - 3 pp,584-590. 2017 ISSN 1745-2473. 2017.	22,806	1	1
3. Neira JL, Bintz J, Arruebo M, Rizzuti B, Bonacci T, Vega S, Lanás a, Velázquez-Campoy A, Iovanna JL, Abián O. Blocking NUPR1 protein, a successful approach for pancreatic adenocarcinoma treatment. <i>Gastroenterology</i> , 152:S-42. 2017	18,392	1	1
4. Somovilla V, Bermejo I, Albuquerque I, Martínez-Sáez N, Castro-López J, Garcia Martin F, Compañón I, Hinou H, Nishimura S-I, Jiménez-Barbero J, Asensio J, Avenoza A, Busto J, Hurtado-Guerrero R, Peregrina J, Bernardes G, Corzana F. The use of fluoroproline in MUC1 antigen enables efficient detection of antibodies in patients with prostate cancer. <i>JACS</i> , DOI: 10.1021/jacs.7b09447. 2017.	13,858	1	1
5. Ferraz de Arruda G, Cozzo E, Peixoto TP, Rodrigues FA, and Moreno Y. Disease Localization in Multilayer Networks. <i>Physical Review X</i> , 7, 011014. 2017.	12,789	1	1
6. Gordon SP, Contreras-Moreira B, Daniel Woods D, Des Marais DL, Burgess D, Shu S, Stritt C, Roulin A, Schackwitz W, Tyler L, Martin J, Lipzen A, Dochy N, Phillips J, Barry K, Geuten K, Juenger TE, Amasino R, Caicedo AL, Goodstein D, Davidson P, Mur L, Figueroa M, Freeling M, Catalan P, Vogel JP. Extensive gene content variation in the <i>Brachypodium distachyon</i> pan-genome correlates with phenotypic variation. <i>Nature Communications</i> 19; 8(1): 2184. 2017.	12,24	1	1
7. Aguiló N, Gonzalo-Asensio J, Alvarez-Arguedas S, Marinova D, Gomez AB, Uranga S, Spallek R, Singh M, Audran R, Spertini F, Martin C. Reactogenicity to major tuberculosis antigens absent in BCG is essential to improve protection against <i>Mycobacterium tuberculosis</i> . <i>Nature Communications</i> , 14;8:16085. doi: 10.1038/ncomms16085. Julio 2017.	12,124	1	1
8. De las Rivas M, Lira-Navarrete E, Earnest James Paul Daniel, Compañón I, Coelho H, Diniz A, Jiménez-Barbero J, Peregrina JM, Clausen H, Corzana F, Marcelo F, Jiménez-Osés G, Gerken TA, and Hurtado-Guerrero R. The interdomain flexible linker of the polypeptide GalNAc transferases (GalNAc-Ts) dictates their long-range glycosylation preferences. <i>Nature Communications</i> , DOI:10.1038/s41467-017-02006-0. 2017.	12,12	1	1
9. Gonzalez-Arzola K, A. Diaz-Quintana, F. Rivero-Rodriguez, A. Velázquez-Campoy, M. De la Rosa, I. Diaz-Moreno. Histone chaperone activity of <i>Arabidopsis thaliana</i> NRP1 is blocked by cytochrome c. <i>Nucleic Acids Research</i> , 45:2150-2165. 2017.	10,162	1	1
10. Wang Z, Jusup M, Wang RW, Shi L, Iwasa Y, Moreno Y and Kurths J. Onymity promotes cooperation in social dilemma experiments. <i>Science Advances</i> , 3:e1601444.2017.	10,13	ND	ND
11. Buey RM, Arellano JB, Lopez-Maury L, Galindo-Trigo S, Velázquez-Campoy A, Revuelta JL, de Pereda J, Florencio F, Schürmann P, Buchanan BB, Balsera M. An unprecedented pathway of reducing equivalents in a diflavin-linked disulfide oxidoreductase. <i>Proceedings of the National Academy of Sciences USA</i> , 114:12725-12730. 2017.	9,661	1	1

12.	Moreno-Beltran B , Guerra-Castellano A, Diaz-Quintana A, Del Conte R, Garcia-Mauriño SM, Diaz-Moreno S, Gonzalez-Arzola K, Santos-Ocaña C, Velázquez-Campoy A, De la Rosa MA, Turano P, Diaz-Moreno I. Structural basis of mitochondrial dysfunction in response to cytochrome c phosphorylation at position 4. Proceedings of the National Academy of Sciences USA 2017 114:E3041-E3050. 2017.	9,661	1	1
13.	Perni M, Galvagnion C, Maltsev A, Meisl G, Müller MB, Challa PK, Kirkegaard JB, Flagmeier P, Cohen SI, Cascella R, Chen SW, Limboker R, Sormanni P, Heller GT, Aprile FA, Cremades N, Cecchi C, Chiti F, Nollen EA, Knowles TP, Vendruscolo M, Bax A, Zaslhoff M & Dobson CM. A natural product inhibits the initiation of alpha-synuclein aggregation and suppresses its toxicity. Proc. Natl. Acad. Sci U.S.A. 2017,114(6):E1009-E1017. 2017.	9,661	1	1
14.	Baity-Jesi M, Calore E, Cruz A, Fernandez LA, Gil-Narvion JM, Gordillo-Guerrero A, Iñiguez D, Maiorano A, Marinari E, Martin-Mayor V, Monforte-Garcia J, Muñoz-Siduepe A, Navarro D, Parisi G, Perez-Gavio S, Ricci-Tersenghi F, Ruiz-Lorenzo JJ, Schifano SF, Seoane B, Tarancon A, Tripiccion R, and Yllanes D. A statics-dynamics equivalence through the fluctuation–dissipation ratio provides a window into the spin-glass phase from nonequilibrium measurements. Proceedings of the National Academy of Sciences,114 - 8, pp. 1838–1843. ISSN 0027-8424. 2017.	9,661	1	1
15.	Buey RM, Galindo-Trigo S, Lopez-Maury L, Velázquez-Campoy A, Revuelta JL, Florencio FJ, de Pereda JM, Schürmann P, Buchanan BB, Balsara M. A new member of the thioredoxin reductase family from early oxygenic photosynthetic organisms. Molecular Plant, 10:212-215. 2017.	8,827	1	1
16.	Rubio-Pérez L, Iglesias M.; Munárriz J, Polo V; Passarelli V, Pérez-Torrente, Oro JJ, L. A. A Well-Defined NHC-Ir(III) Catalyst for the Silylation of Aromatic C–H Bonds: Substrate Survey and Mechanistic Insights. Chem. Sci., 8, 4811-4822. 2017.	8,688	1	2
17.	Orue A, Uria U, Roca-López D, Delso I, Reyes E, Carrillo L, Merino P, Vicario JL. Racemic hemiacetals as oxygen-centered pronucleophiles triggering cascade 1, 4-addition/Michael reaction through dynamic kinetic resolution under iminium catalysis. Development and mechanistic insights. Chemical Science, 4-8. p.p. 2904-2913. 2017. ISSN 2041-652. 2017.	8,668	1	2
18.	Antonioni A, Cardillo A. Coevolution of Synchronization and Cooperation in Costly Networked Interactions. Physical Review Letters, 118. p.p. 238301 [5 pp]. 2017. ISSN 0031-9007.2017.	8,462	1	1
19.	Baity-Jesi M, Calore E, Cruz A, Fernandez L.A, Gil-Narvion J.M, Gordillo-Guerrero A, Iñiguez D, Maiorano A, Marinari E, Martin-Mayor V, Monforte-Garcia J, Muñoz-Siduepe A, Navarro D, Parisi G, Perez-Gavio S, Ricci-Tersenghi F, Ruiz-Lorenzo J.J, Schifano S.F, Seoane B, Tarancon A, Tripiccion R, Yllanes D. Matching Microscopic and Macroscopic Responses in Glasses. Physical Review Letters,118 -15 pp. 157202 [6 pp]. 2017. ISSN 0031-9007. 2017.	8,462	1	1
20.	Sancho R, Cantalapiedra CP, López-Álvarez D, Gordon SP, Vogel JP, Catalan P, Contreras-Moreira B. 2017. Comparative plastome genomics and phylogenomics of <i>Brachypodium</i> : flowering time signatures, introgression and recombination in recently diverged ecotypes. New Phytologist (doi: 10.1111/nph.14926). 2017	7,33	1	1
21.	Núñez D, D. Sanchez-Martinez, M. Perez-Hernandez, L. Comas, E. Catalan, M.P. Domingo, I. Vallerdo, A. Velázquez-Campoy, J. Pardo, E.M. Galvez. A functional analysis on the interspecies interaction between mouse LFA-1 and human intercellular adhesion molecule-1 at the cell level. Frontiers in Immunology 2017 8:1817. 2017.	6,429	1	2
22.	Gonzalo-Asensio J, Dessislava Marinova, Carlos Martin, Nacho Aguilo. MTBVAC: Attenuating the human pathogen of tuberculosis towards a promising vaccine against the TB epidemic. Frontiers in Immunology. 15 Diciembre 2017.	6,429	1	2
23.	Costa-Gouveia J, Aínsa JA, Brodin P, Lucía A. How can nanoparticles contribute to antituberculosis therapy?. Drug Discov Today, ;22(3):600-607. doi: 10.1016/j.drudis.2017.01.011. 2017 Mar.	6,396	1	1
24.	Rodrigues L, Parish T, Balganes M, Ainsa JA. Antituberculosis drugs: reducing efflux=increasing activity. Drug Discov Today, 22(3):592-599. doi: 10.1016/j.drudis.2017.01.002. 2017 Mar.	6,369	1	1

25. Llobet L, Bayona-Bafaluy MP, Pacheu-Grau D, Torres-Pérez E, Arbones-Mainar JM, Navarro MÁ, Gómez-Díaz C, Montoya J, López-Gallardo E, Ruiz-Pesini E. Pharmacologic concentrations of linezolid modify oxidative phosphorylation function and adipocyte secretome. Redox Biol., 13:244-254. doi: 10.1016/j.redox.2017.05.026. 2017Oct	6,337	1	2
26. Iturmendi A, Iglesias M, Munarriz J, Polo V, Pérez-Torrente JJ, Oro, LA. Efficient Preparation of Carbamates by Rh-Catalysed Oxidative Carbonylation: Unveiling the Role of the Oxidant. Chem. Comm.53, 404-407. 2017.	6,319	1	2
27. Ceballos-Laita L, Marcuello C, Lostao A, Calvo-Begueria L, Velázquez-Campoy A, Bes T, Fillat M, Peleato ML. Microcystin-LR binds iron and iron promotes self-assembly. Environmental Science & Technology. 51:4841-4850. 2017.	6,198	1	1
28. Julián A, Polo V, Fernández-Alvarez FJ, Oro L. A. Iridium-NSiN catalyzed formation of silylphosphinecarboxylates from the reaction of CO ₂ with P(SiMe ₃)R ₂ (R = Ph, Cy). Catal. Sci. Technol., 1372-1378. 2017.	5,772	1	2
29. Filice M, Molina M, Benaiges MD, Abián O, Valero F and Palomo JM. Solid-surface activated recombinant Rhizopus oryzae lipase expressed in <i>Pichia Pastoris</i> and chemically modified variants as efficient catalysts in the synthesis of hydroxy monodeprotected glycols. Catal. Sci. Technol., 7,1766. DOI: 10.1039/C7CY00255F. 2017.	5,733	1	2
30. Juste-Navarro V, Prieto L, Delso I, Manzano R, Tejero T, Reyes E, Vicario J. L, Merino P. A Case Study of Thiourea-Assisted Iminium Formation by Hydroxyl Anion Binding: Kinetic. Spectroscopic and Computational Evidences. Adv. Synth. Catal, 359 4122-4128. 2017	5,65	1	1
31. Rabasa-Alcañiz F, Torres J, Sánchez-Roselló M, Tejero T, Merino P, Fustero S, del Pozo C. Organocatalytic Enantioselective Synthesis of Trifluoromethyl-Containing Tetralin Derivatives by Sequential (Hetero)Michael Reaction-Intramolecular Nitron Cycloaddition. Advanced Synthesis & Catalysis, 21 - 359. p.p. 3752-3764. 2017. ISSN 1615-4150. 2017.	5,646	1	1
32. Julian A, Guzman J, Jaseer E. A, Fernandez-Alvarez F. J, Royo R, Polo V, García-Orduña P, Lahoz F. J, Oro L. A. Mechanistic Insights on the Reduction of CO ₂ to Silylformates Catalyzed by Ir-NSiN Species. Chemistry European Journal, 23 11898-11907. 2017	5,317	1	2
33. Prieto L, Juste-Navarro V, Uria U, Delso I, Reyes E, Tejero T, Carrillo L, Merino P, Vicario J.L. Regioselectivity Change in the Organocatalytic Enantioselective (3+2) Cycloaddition with Nitrones through Cooperative Hydrogen-Bonding Catalysis/Iminium Activation. Chemistry-A European Journal, 12 - 23. p.p. 2764-2768. 2017. ISSN 0947-6539. 2017.	5,317	1	2
34. Carl E Koppeschaar, Colizza V, Guerrisi C, Turbelin C, Duggan J, Edmunds WJ, Kjelsø C, Mexia R, Moreno Y, Meloni S, Paolotti D, Perrotta D, van Straten E, Franco AO. Influenzanet: Citizens Among 10 Countries Collaborating to Monitor Influenza in Europe. JMIR public health and surveillance.	5,175	ND	ND
35. Estrada F, García de Jalón Á, Borque A, Esteban Escaño LM, Gil, MJ, Sanz Sáiz, G. Testosterone recovery after long time deprivation therapy: predictive factors and models (nomograms). Journal of Urology, 4 Suppl - 197. p.p. e714. ISSN 0022-5347. 2017.	5,157	1	2
36. Estrada Domínguez F, Borque Fernando Á, Esteban Escaño LM, Gil Sanz MJ, Sanz Saiz G. Testosterone recovery after long time androgen deprivation therapy: The role of duration of deprivation in combination with other predictive factors. European Urology Supplements, 3 - 16. p.p. e87-e88. 2017. ISSN 1569-9056. 2017.	5,157	1	2
37. Merino P; Chiacchio MA, Legnani Laura, Delso I, Tejero T. Introducing topology to assess the synchronicity of organic reactions. Dual reactivity of oximes with alkenes as a case study. Organic Chemistry Frontiers, 8. p.p. 1541-1554. ISSN 2052-4110. 2017.	4,955	1	1
38. Saiz H, Gómez-Gardeñes J, Nuche P, Girón A, Pueyo Y, Alados CL. Evidence of structural balance in spatial ecological networks. Ecography, 40 (6), 733-741 (2017).	4,902	1	1
39. Mahía, A, Badorrey R, Gálvez JA, Díaz-de-Villegas, MD. Diastereoselective construction of the 6-Oxa-2-azabicyclo[3.2.1]octane Scaffold from Chiral α -Hydroxyaldehyde derivatives by the Aza-Prins reaction. Journal of Organic Chemistry, 15 - 82. p.p. 8048-8057. 2017. ISSN 0022-3263. 2017.	4,849	1	2

40.	González JF, Rocchi D, Tejero T, Merino P, Menéndez JC. One-Pot Synthesis of Functionalized Carbazoles via a CAN-Catalyzed Multicomponent Process Comprising a C-H Activation Step. <i>Journal of Organic Chemistry</i> , 14 - 82. p.p. 7492-7502. 2017. ISSN 0022-3263. 2017.	4,849	1	2
41.	Gracia J, Munarriz J, Polo V, Sharpe R, Jiao Y, Niemantsverdriet J.W, Lim T. Analysis of the Magnetic Entropy in Oxygen Reduction Reactions Catalysed by Manganite Perovskites. <i>ChemCatChem</i> , 9, 3358–3363. 2017.	4,803	1	2
42.	Gracia J, Munarriz J, Polo V, Sharpe R, Jiao Y, Niemantsverdriet JWH, Lim T. Analysis of the Magnetic Entropy in Oxygen Reduction Reactions Catalysed by Manganite Perovskites. <i>Chemcatchem</i> , 17 - 9. p.p. 3358-3363. 2017. ISSN 1867-3880. 2017.	4,803	1	2
43.	Borge-Holthoefer J, Alvarez Baños R, Gracia-Lázaro C, Moreno Y. Emergence of consensus as a modular-to-nested transition in communication dynamics. <i>Scientific Reports</i> , 7, 41673. 2017.	4,259	1	2
44.	Chen W, Gracia-Lázaro C, Li Z, Wang L, Moreno Y. Evolutionary dynamics of N-person Hawk-Dove games. <i>Scientific Reports</i> , 7(1), 4800. 2017.	4,259	1	2
45.	Aleta A, Meloni S, Moreno Y. A Multilayer perspective for the analysis of urban transportation systems. <i>Scientific reports</i> , 7, 44359. 2017.	4,259	1	2
46.	Bergues-Pupo AE, Gutiérrez I, Arias-Gonzalez JR, Falo F, and Fiasconaro A. Mesoscopic model for DNA G-quadruplex unfolding. <i>Scientific Reports</i> , 7, 11756. 2017.	4,259	1	2
47.	Claveria-Gimeno R, Lanuza PM, Morales-Chueca I, Jorge OC, Vega S, Abián O, Esteller M, Velázquez-Campoy A. The intervening domain from MeCP2 enhances the DNA affinity of the methyl binding domain and provides an independent DNA interaction site. <i>Scientific Reports</i> , 2017 7:41635. 2017.	4,259	1	2
48.	Fiasconaro A, Mazo JJ, and Falo F. Active translocation of a semiexible polymer assisted by an ATP-based molecular motor. <i>Scientific Reports</i> , 7, 4188. 2017.	4,259	1	2
49.	Huijbers ME, Martínez-Júlvez M, Westphal AH, Delgado-Arciniega E, Medina M and van Berkel WJH. Proline dehydrogenase from <i>Thermus thermophilus</i> does not discriminate between FAD and FMN as cofactor. <i>Scientific Reports</i> , 7:43880. 2017.	4,259	1	2
50.	Neira JL, Bintz J, Arruebo M, Rizzuti B, Bonacci T, Vega S, Lanás A, Velázquez-Campoy A, Iovanna JL, Abián O. Identification of a drug targeting an intrinsically disordered protein involved in pancreatic adenocarcinoma. <i>Scientific Reports</i> 7:39732. 2017.	4,259	1	2
51.	Sebastian M, Serrano A, Velázquez-Campoy A, Medina M. Kinetics and thermodynamics of the protein-ligand interactions in the riboflavin kinase activity of the FAD synthetase from <i>Corynebacterium ammoniagenes</i> . <i>Scientific Reports</i> , 7:7281. 2017.	4,259	1	2
52.	Sebastian M, Lira-Navarrete E, Serrano A, Marcuello C, Velázquez-Campoy A, Lostao A, Hurtado-Guerrero R, Medina M, Martínez-Júlvez M. The FAD synthetase from the human pathogen <i>Streptococcus pneumoniae</i> : A bifunctional enzyme exhibiting activity-dependent redox requirements. <i>Scientific Reports</i> 2017 7:7609. 2017.	4,259	1	2
53.	Serrano A, Sebastian M, Arilla-Luna S, Baquedano S, Herguedas B, Velázquez-Campoy A, Martínez-Júlvez M, Medina M. The trimer interface in the quaternary structure of the bifunctional prokaryotic FAD synthetase from <i>Corynebacterium ammoniagenes</i> . <i>Scientific Reports</i> , 2017 7:404. 2017.	4,259	1	2
54.	Sebastián M, Lira-Navarrete E, Serrano A, Marcuello C, Velázquez-Campoy A, Lostao A, Hurtado-Guerrero R, Medina M, and Martínez-Júlvez M. <i>Streptococcus pneumoniae</i> : a bifunctional enzyme exhibiting activity-dependent redox requirements. <i>Scientific Reports</i> , DOI: 10.1038/s41598-017-07716-5. 2017.	4,259	1	2
55.	Minaya M, Hackel J, Namaganda M, Brochmann C, Vorontsova MS, Besnard G, Catalán P. Contrasting dispersal histories of broad- and fine-leaved temperate Liliaceae grasses: range expansion, founder events, and the roles of distance and barriers. <i>Journal of Biogeography</i> , 44, 9, p.p. 2916-2917. ISSN 0305-0270. 2017.	4,248	1	2
56.	Elqaidi S, Chen k, Halim A, Siukstaite L, Rueter C, Hurtado-Guerrero R, Clausen H, and Hardwidge PR. NleB/SseK effectors from <i>Citrobacter rodentium</i> , <i>Escherichia coli</i> , and <i>Salmonella enterica</i> . <i>JBC</i> , (292): 27, 11423-11430. DOI: 10.1074/jbc.M117.790675: JUL 7 2017.	4,125	2	3

57.	Liu F, Kai Xu, Zhijue Xu, Matilde de las Rivas, Xing Li, Jishun Lu, Ignacio Delso, Pedro Merino, Ramon Hurtado-Guerrero, and Yan Zhang. Luteolin can directly inhibit ppGalNAc-Ts and selectively reduce mucin-type O-glycosylation on amyloid precursor protein. Journal of Biological Chemistry, DOI: 10.1074/jbc.M117.814202. 2017	4,125	2	3
58.	Carro J, Martínez-Júlvez M, Medina M, Martínez AT and Ferreira P. Protein dynamics promote hydride tunnelling in substrate oxidation by aryl-alcohol oxidase. PhysChemChemPhys, 19, 28666 DOI: 10.1039/c7cp05904c. 2017.	4,123	1	2
59.	Lamazares E, Vega S, Ferreira P, Medina M, Galano JJ, Martinez-Julvez M, Velázquez-Campoy A, Sancho, J. Direct examination of the relevance for folding, binding and electron transfer of a conserved protein folding intermediate. Physical Chemistry Chemical Physics, 19:19021-19031. 2017.	4,123	1	2
60.	Royes J, Polo V, Uriel S, Oriol L, Piñol M, Tejedor RM. Chiral Supramolecular Organization from a Sheet-like Achiral Gel: Study of the Chiral Photoinduction. PCCP 19, 13622-13628. 2017.	4,123	1	2
61.	Tapia-Rojo R, Marcuello C, Lostao A, Gómez-Moreno C, Mazo JJ and Falo F. A Physical Picture for Mechanical Dissociation of Biological Complexes: from Forces to Free Energies. Physical Chemistry Chemical Physics, 9, 4567 - 4575. 2017.	4,123	1	2
62.	López-Alvarez D, Zubair H, Beckmann M, Draper J, Catalán P. Diversity and association of phenotypic and metabolomic traits in the close model grasses <i>Brachypodium distachyon</i> , <i>B. stacei</i> and <i>B. hybridum</i> . Annals of Botany 119 (4): 545-561. 2017.	4,04	1	2
63.	Mena I, Garcia-Orduña P, Polo V, Lahoz F, Casado MA, Oro L. A. Reactivity of Parent Amido Complexes of Iridium with Olefins: C-NH2 Bond Formation versus C-H Activation, Dalton Trans,46, 11459-11468. 2017.	4,029	1	2
64.	Singh V, Dhar N, Pató J, Kolly GS, Korduláková J, Forbak M, Evans JC, Székely R, Rybníček J, Palčková Z, Zemanová J, Santi I, Signorino-Gelo F, Rodrigues L, Vocat A, Covarrubias AS, Rengifo MG, Johnsson K, Mowbray S, Buechler J, Delorme V, Brodin P, Knott GW, Ainsa JA, Warner DF, Kéri G, Mikušová K, McKinney JD, Cole ST, Mizrahi V, Hartkoorn RC. Identification of aminopyrimidine-sulfonamides as potent modulators of Wag31-mediated cell elongation in mycobacteria. Mol Microbiol ;103(1):13-25. doi: 10.1111/mmi.13535. 2017 Jan.	3,898	1	3
65.	Claveria-Gimeno R, Vega S, Abián O, Velázquez-Campoy A. A look at ligand binding thermodynamics in drug discovery. Expert Opinion on Drug Discovery, 12:363-377. 2017.	3,876	1	2
66.	Mulo P and Milagros Medina. Interaction and electron transfer between ferredoxin-NADP+ oxidoreductase and its partners: structural, functional and physiological implications. Photosynthesis Research, DOI: 10.1007/s11120-017-0372-0. 2017.	3,864	1	2
67.	Palacios L, Meheut Y, Galiana-Cameo M, Artigas MJ, Di Giuseppe A, Lahoz FJ, Polo V, Castarlenas R, Pérez-Torrente JJ and Luis Oro LA. Design of Highly Selective Alkyne Hydrothiolation Rh(I)-NHC Catalysts: Carbonyl-Triggered Non-Oxidative Mechanism, Organometallics, 2017, 36 (11), pp 2198–2207. 2017.	3,862	1	2
68.	Cremades N, Chen SW & Dobson CM. Structural characteristics of alpha-synuclein oligomers. Int. Rev. Cell Mol. Biol. 329:79-143. 2017.	3,856	2	3
69.	Alonso L, Mendez-Bermudez JA, Gonzalez-Melendrez A, and Moreno Y. Weighted random-geometric and random-rectangular graphs: Spectral and eigenfunction properties of the adjacency matrix. Journal of Complex Networks, DOI: https://doi.org/10.1093/comnet/cnx053. 2017.	3,69	1	1
70.	Ferraz de Arruda G, Rodrigues FA, Martin-Rodriguez P, Cozzo E, and Moreno Y. A General Markov Chain Approach for Disease and Rumor Spreading in Complex Networks. Journal of Complex Networks , DOI: https://doi.org/10.1093/comnet/cnx024. 2017.	3,69	1	1

71.	Lazo-Fernández Y, Baile G, Meade P, Torcal P, Martínez L, Ibañez C, Bernal ML, Viollet B, Giménez I. Kidney-specific genetic deletion of both AMPK α -subunits causes salt and water wasting. <i>Am J Physiol Renal Physiol</i> . 2017 Feb 1;312(2):F352-F365. 2017.	3,611	1	2
72.	Liu J, Bruhn DF, Lee RB, Zheng Z, Janusic T, Scherbakov D, Scherman MS, Boshoff HI, Das RakeshR, Waidyarachchi SL, Brewer TA, Gracia B, Yang L, Bollinger J, Robertson GT, Meibohm B, Lenaerts AJ, Ainsa J, Böttger EC, Lee RE. Structure-Activity Relationships of Spectinamide Antituberculosis Agents: A Dissection of Ribosomal Inhibition and Native Efflux Avoidance Contributions. <i>ACS Infect Dis.</i> ;13;3(1):72-88. doi: 10.1021/acsinfecdis.6b00158. 2017.	3,6	1	2
73.	Ríos-Gutiérrez M, Darù A, Tejero T, Domingo LR, Merino P. A molecular electron density theory study of the 3 + 2] cycloaddition reaction of nitrones with ketenes. <i>Organic & Biomolecular Chemistry</i> , 7 - 15. p.p. 1618-1627. 2017. ISSN 1477-0520. 2017.	3,564	1	2
74.	Merino P, Tejero T, Delso I, Matute R. New mechanistic interpretations for nitrone reactivity. <i>Organic & Biomolecular Chemistry</i> , 16 - 15. p.p. 3364-3375. 2017. ISSN 1477-0520. 2017.	3,564	1	3
75.	Marinova D, Gonzalo-Asensio J, Aguiló N, Martín C. MTBVAC from discovery to clinical trials in tuberculosis-endemic countries. <i>Expert Review of Vaccines</i> , 6 - 16. p.p. 565-576. 2017. ISSN 1476-0584. 2017.	3,555	2	4
76.	Lancelot A, Claveria-Gimeno R, Velázquez-Campoy A, Abián O, Serrano JL, Sierra T. Nanostructures based on amino-terminated amphiphilic Janus dendrimers as camptothecin carriers with antiviral activity. <i>European Polymer Journal</i> 2017 90:136-149. 2017.	3,531	1	2
77.	Sevilla E, Yuste L, Moreno R, Rojo F. Differential expression of the three <i>Alcanivorax borkumensis</i> SK2 genes coding for the P450 cytochromes involved in the assimilation of hydrocarbons. <i>Environmental Microbiology Reports</i> , 6 - 9. p.p. 797-808. 2017. ISSN 1758-2229. 2017.	3,363	2	3
78.	Minna M, Koskela, Dahlström K, Goñi G, Lehtimäki N, Nurmi M, Velázquez-Campoy A, Hanke G, Bölter B, Salminen TA, Medina M and Mulo P. Arabidopsis FNRL protein is an NADPH-dependent chloroplast oxidoreductase resembling bacterial ferredoxin-NADP ⁺ reductases. <i>Physiol. Plantarum</i> . doi: 10.1111/ppl.12621. 2017.	3,33	1	2
79.	Pujols J, Peña S, Conde-Giménez M, Pinheiro F, Navarro S, Sancho J and Ventura S. High-Throughput Screening Methodology to Identify Alpha-Synuclein Aggregation Inhibitors. <i>Int. J. Mol. Sci</i> 2017, 18, 478; doi:10.3390/ijms18030478. 2017.	3,226	2	4
80.	Delso I, Valero-Gonzalez J, Gomollon-Bel F, Castro-Lopez J, Fang W, Navratilova I, van Aalten DMF, Tejero T, Merino P and Hurtado-Guerrero R. Inhibitors against Fungal Cell Wall-remodelling Enzymes. <i>ChemMedchem</i> , 2017. DOI: 10.1002/cmdc.201700720. 2017.	3,225	2	3
81.	Marques I, Shiposha V, López-Álvarez D, Manzaneda A, Hernández P, Olonova M, Catalan P. Environmental isolation explains Iberian genetic diversity in the highly homozygous model grass <i>Brachypodium distachyon</i> . <i>BMC Evolutionary Biology</i> , 17: 139. 2017.	3,22	2	4
82.	Claveria-Gimeno R, Velázquez-Campoy A, Pey AL. Thermodynamics of cooperative binding of FAD to human NQO1: Implications to understanding cofactor-dependent function and stability of the flavoproteome. <i>Archives of Biochemistry and Biophysics</i> 2017 636:17-27. 2017.	3,165	2	4
83.	Maiuolo L, Merino P, Algieri V, Nardi M, Gioia M L.D, Russo B, Delso I, Tallarida MA, Nino AD. Nitrones and nucleobase-containing spiro-isoxazolidines derived from isatin and indanone: solvent-free microwave-assisted stereoselective synthesis and theoretical calculations. <i>RSC Adv.</i> , 7 48980-48988. 2017.	3,11	2	4
84.	Merino P, Maiuolo L, Delso I, Algieri V, De Nino A.; Tejero T. Chemical approaches to inhibitors of isoprenoid biosynthesis: targeting farnesyl and geranylgeranyl pyrophosphate synthases. <i>RSC Advances</i> , 18 - 7. p.p. 10947-10967. 2017. ISSN 2046-2069. 2017.	3,108	2	4
85.	Aprile FA, Arodio P, Fusco G, Chen SW, Kumita JR, Dhulesia A, Tortora P, Knowles TP, Vendruscolo M, Dobson CM & Cremades N. Inhibition of alpha-synuclein fibril elongation by Hsp70 is governed by a kinetic binding competition between alpha-synuclein species. <i>Biochemistry</i> , 56(9):1177-1180. 2017.	2,938	2	4

86.	Huang W, Briffotiaux J, Wang X, Liu L, Hao P, Cimino M, Buchieri MV, Namouchi A, Ainsa JA, Gicquel B. Ionophore A23187 shows anti-tuberculosis activity and synergy with tebipenem. Tuberculosis (Edinb). 107:111-118. doi: 10.1016/j.tube.2017.09.001. 2017.	2,873	2	3
87.	Merino P, Chiacchio MA, Legnani L, Tejero T. BET & ELF quantum topological analysis of neutral 2-aza-cope rearrangement of gamma-alkenyl nitrones. MOLECULES. 8 - 22. p.p. 1371 [14 pp]. ISSN 1420-3049. 2017.	2,861	2	3
88.	Chiacchio MA, Legnani L, Caramella P, Tejero T, Merino P. Pivotal Neighboring-Group Participation in Substitution versus Elimination Reactions – Computational Evidence for Ion Pairs in the Thionation of Alcohols with Lawesson's Reagent. European Journal of Chemistry, 14 - 2017. p.p. 1952-1960. 2017. ISSN 1434-193X. 2017.	2,834	2	4
89.	Latorre P, Varona L, Burgos C, Carrodegua JA, López-Buesa P. O-GlcNAcylation mediates the control of cytosolic phosphoenolpyruvate carboxykinase activity via Pgc1a. Plos One, 6 - 12. p.p. 0179988 [14 pp]. 2017. ISSN 1932-6203. 2017.	2,806	1	3
90.	Fantin G, Fogagnolo M, Delso I, Merino P. Exploratory spectroscopic and computational studies of the anion binding properties of methyl hyocholate in organic solvent. Tetrahedron, 13 - 73. p.p. 1698-1704. 2017. ISSN 0040-4020. 2017.	2,651	2	4
91.	Pablo-Navarro J, Sanz-Hernández D, Magén C, Fernández-Pacheco A, De Teresa JM. Tuning shape, composition and magnetization of 3D cobalt nanowires grown by focused electron beam induced deposition (FEBID). Journal of Physics D-Applied Physics, 18 - 50. p.p. 231002 [9 pp]. 2017. ISSN 0022-3727. 2017.	2,588	2	3
92.	Olonova M, Pulkina SV, Catalan P. Taxonomic note: Chromosome numbers of Poa sect. Stenopoa species from Tajikistan. Taxon (early view E19-E21). 2017.	2,44	2	3
93.	Méndez-Bermúdez JA, Ferraz de Arruda G, Rodrigues FA, and Moreno Y. Scaling Properties of Multilayer Random Networks. Physical Review E 96:012307. 2017.	2,366	1	1
94.	Amanatidis I, Klefogiannis I, Falceto F, and Gopar VA. Coherent wave transmission in quasi-one-dimensional systems with Lévy disorder. Physical Review E, volumen: 96, páginas. 062141-1, 062141-10. 2017.	2,366	1	2
95.	Serrano AB, Gómez-Gardeñes J, Andrade RFS. Optimizing diffusion in multiplexes by maximizing layer dissimilarity. Physical Review E 95 (5), 052312. 2017.	2,288	1	1
96.	Aleta A, Hisi A, Meloni S, Poletto C, Colizza V, Moreno Y. Human mobility networks and persistence of rapidly mutating pathogens. Royal Society Open Science. 4 (3), 160914. 2017.	2,243	1	2
97.	Meloni S, Xia C-Y, Moreno Y. Heterogeneous resource allocation can change social hierarchy in public goods games. Royal Society Open Science, 4 (3), 170092. 2017.	2,243	1	2
98.	Ares F, Esteve JG, Falceto F, De Queiroz AR. Entanglement entropy and Möbius transformations for critical fermionic chains. Journal of Statistical Mechanics-Theory and Experiment, 6 ISSN 1742-5468. 2017.	2,196	1	2
99.	Pimentel M, Escudero M, Sahuquillo E, Minaya MA, Catalán P. Diversification rates and chromosome evolution in the temperate grasses (Pooideae) are associated with major environmental changes in the Oligocene-Miocene. PeerJ 5:e3815. 2017.	2,17	2	4
100.	Méndez-Bermúdez JA, Ferraz de Arruda G, Rodrigues FA, and Moreno Y. Diluted banded random matrices: Scaling behavior of eigenfunction and spectral properties. J. Phys. A: Math. Theor. 50, 495205. 2017.	1,865	1	2
101.	Cariñena JF, Clemente-Gallardo J, Jover-Galtier JA and Marmo G. Tensorial dynamics on the space of quantum states. J. Phys. A: Math. Theor. , 50, 365301, 2017.	1,865	1	3
102.	Fernández-Crehuet JM, Gimenez-Nadal JI, and Dánvila del Valle I. The International Multidimensional Fertility Index©: The European Case. Social Indicators Research 132(3): 1331-1358. 2017.	1,743	1	2

103. Savirón Cornudella R, Esteban Escaño LM, Lerma D, Cotaina L, Borque Fernando Á, Sanz Sáiz G, Castán S. Comparison of fetal weight distribution improved by paternal height by Spanish standard versus Intergrowth 21st standard. <i>Journal of Perinatal Medicine</i> , p.p. [10 pp.]. ISSN 0300-5577. 2017.	1,577	3	6
104. Campaña Naranjo JC, Gimenez-Nadal JL, Molina Chueca JA. Gender Norms and the Gendered Distribution of Total Work in Latin American Households. <i>Feminist Economics</i> , p.p. 1-28. ISSN 1354-5701. 2017.	1,476	1	3
105. Wang Z, Moreno Y, Boccaletti S, Perc M. Vaccination and epidemics in networked populations — An introduction. <i>Chaos, Solitons and Fractals</i> 103, 177-183. 2017.	1,455	1	1
106. Kammerlander D, Castro A and Marques MAL. Optimization of the ionization time of an atom with tailored laser pulses: a theoretical study. <i>Eur. Phys. J. B</i> 90, 91. 2017.	1,436	3	6
107. Rubio-Ruiz B, Ríos-Marco P, Carrasco MP, Espinosa A, Hurtado-Guerrero R, Marco C, Conejo-García A and Entrena Guadix A J. Choline Kinase Inhibition and Docking Studies of a Series of 6-(benzylthio)-9H-purin-9-yl-pyridinium derivatives. <i>Medicinal Chemistry Research</i> , DOI: 10.1007/s00044-017-1979-6, 2017.	1,227	4	8
108. Campaña JC, Gimenez-Nadal J, Molina JA. Increasing the Human Capital of Children in Latin American Countries: The Role of Parents' Time in Childcare. <i>Journal of Development Studies</i> , 6 - 53. p.p. 805-825 [21 p.]. ISSN 0022-0388. 2017.	1,134	2	4
109. Cariñena JF, Clemente-Gallardo J, Jover-Galtier JA and Marmo G, Tangent bundle geometry from dynamics: Application to the Kepler problem, <i>International Journal of Geometric Methods Modern Physics</i> , 14, 1750047. 2017.	1,068	3	7
110. Ares, F, Esteve JG, Falceto F, De Queiroz, A R. Complex geometry in the entanglement entropy of fermionic chains. <i>International Journal of Geometric Methods in Modern Physics</i> , 8 - 14. p.p. [17 pp.]. ISSN 0219-8878. 2017.	1,068	3	7
111. Gimenez-Nadal JI, Molina JA, Zhu Y. Intergenerational mobility of housework time in the United Kingdom. <i>Review of Economics of the Household</i> , p.p. 1-27. 2017. ISSN 1569-5239. 2017.	0,972	2	5
112. Oliver de la Esperanza A; Arenas Martínez A; Tzeek Tuz M; Pérez-Collazos E. Are anthropogenic factors affecting nesting habitat of sea turtles? The case of Kanzul beach, Riviera Maya-Tulum (Mexico). <i>Journal of Coastal Conservation</i> , 1 - 21. p.p. [9 pp.]. ISSN 1400-0350. 2017.	0,959	3	7
113. Gracia-Lazaro C, Floria LM, Moreno Y. Cognitive hierarchy theory and two-person games. <i>Games</i> 8(1), 1. 2017.	0,87	2	5
114. Almudi I, Fatas-Villafranca F, Izquierdo LR, Potts J. The economics of utopia: a co-evolutionary model of ideas, citizenship and socio-political change. <i>Journal of Evolutionary Economics</i> , p.p. 1-34. 2017. ISSN 0936-9937. 2017.	0,862	3	6
115. Gimenez-Nadal JI, Molina JA and Ortega R. Like my parents at home? Gender differences in childrens' housework in Germany and Spain, <i>Empirical Economics</i> 52(4): 1143-1179. 2017.	0,645	3	7
116. Andaluz J, Pérez M, Molina JA. The effects of inter-generational transfers on the marital surplus. <i>Manchester School</i> , 3 - 85. p.p. 320-338. 2017. ISSN 1463-6786. 2017.	0,615	3	7
117. Osacar C and Pacheco AF. A Mean Field Approach to the Ising Chain in a Transverse. <i>European J. Phys.</i> 38, 045404. 2017.	0,614	4	8
118. Wang H, Gimenez-Nadal JI. Teens and twenties: cultural and preferences differences in the uses of time in Spain. <i>Applied Economics Letters</i> , 1 - 25. p.p. 51-55. 2017. ISSN 1350-4851. 2017.	0,478	4	8
119. Molina JA, Campaña JC, Ortega R. Children's interaction with the Internet: time dedicated to communications and games. <i>Applied Economics Letters</i> , 6 - 24. p.p. 359-364. 2017. ISSN 1350-4851. 2017.	0,478	4	9

120. Almudí I, Fatás Villafranca F, Jarne G, Sánchez Chóliz J. Rethinking Macroeconomic Policy within a Simple Dynamic Model. <i>Metroeconomica</i> , 3 - 68. p.p. 425-464. 2017. ISSN 0026-1386. 2017.	0,475	4	9
121. Spigolon D, Travis Gallagher D, Velázquez-Campoy A, Bulone D, Narang J, San Biagio PL, Cappello F, Macario AJL, Conway de Macario E, Robb FT. Quantitative analysis of the impact of a human pathogenic mutation on the CCT5 chaperonin subunit using a proxy archaeal ortholog. <i>Biochemistry and Biophysics Reports</i> 2017 12:66-71. 2017.	NO	NO	NO
122. Migliano AB, AE Page AE, Gómez-Gardeñes J, Salali GD, Viguier S, Dyble M, Thompson J, Chaudhary N, Smith D, Strods J, Mace R, Thomas MG, Latora V, Vinicius L. Characterization of hunter-gatherer networks and implications for cumulative culture. <i>Nature Human Behaviour</i> 1, 43. 2017.	ND	ND	ND

Otras publicaciones

Patricia Ferreira, Raquel Villanueva, Marta Martínez-Júlvez, Milagros Medina. AIFM1 (Apoptosis inducing factor, mitochondrion-associated,1). Capítulo libro: <i>Encyclopedia of Signaling Molecules</i> , 2nd Edition. ISBN: 978-1-4614-6438-9 (Print) 978-1-4614-6438-9 (Online). 2017 S. Choi Ed.
Jesús Gonzalo-Asensio, Nacho Aguilo, Dessislava Marinova and Carlos Martin. <i>Breaking Transmission with Vaccines: The Case of Tuberculosis</i> . Microbiology Spectrum. Julio 2017
Dessislava Marinova, Jesús Gonzalo-Asensio, Nacho Aguiló and Carlos Martín. <i>MTBVAC from discovery to clinical trials in tuberculosis-endemic countries</i> . Expert Review of Vaccines. Abril 2017
Esther Broset and Jesús Gonzalo-Asensio (autor de correspondencia). <i>Adaptative Evolution of the Mycobacterium tuberculosis Complex to different hosts</i> . Genetics and Evolution of Infectious Diseases. (ISBN: 978-0-12-799942-5) Editorial: Elsevier. 2017 Participación por invitación expresa del editor.

ANEXO 2. Participación en Conferencias, Comunicaciones a congresos orales y posters.

Conferencias invitadas

1. Drug discovery for infectious and genetic diseases: Challenges and opportunities. A. Velázquez-Campoy. 8th China International Medical Conference – Medicine and Health Industry International Cooperation Conference. Taizhou, Septiembre 2017.
2. Elucidating the mechanisms of Protein O-Glycosylation and their implications in disease. University of York. 2017.
3. Structure and mechanism of GalNAc-Ts. Copenhagen University. 2017.
4. Rational thermostabilization of a three-state protein and testing the role of a native-basin intermediate. Javier Sancho. XVI Congreso de la SBE. Sevilla (España). 2017
5. Rational structural and energetic model of the unfolded-state of proteins. Juan José Galano & Javier Sancho. XVI Congreso de la SBE. Sevilla (España). 2017
6. Interpretación del cribado neonatal: de la mutación al paciente. Javier Sancho. Reunión Hispano-Lusa sobre nuevos retos en los errores congénitos del metabolismo. Santiago de Compostela (España). 2017.
7. Mutations in proteins: MD for diagnostics and chaperones for therapy. Javier Sancho. Genetic interpretation of rare diseases: from mutation to patient. Baracaldo (España). 2017.
8. Rational stabilization of non two-state proteins: and relevance of native-basin folding intermediates. Javier Sancho, Emilio Lamazares 23rd INPEC Meeting: Protein structure, function and engineering. Kolkata (India).
9. Genomics and evolution of the allotetraploid model grass *Brachypodium hybridum*. CATALAN P. Congreso: 3rd International Brachypodium Conference. Beijing (China). Julio 2017.
10. Kinetics and thermodynamics in ligands binding as FMN production determinants in bifunctional FAD synthetases. M. Sebastián, A. Serrano, A. Velázquez-Campoy, M. Medina. 19th International Symposium on Flavins and Flavoproteins. Groningen, Holanda. July 2-7, 2017.
11. From antiapoptosis to detOXification: stumblin' in!. S. Vega, G. Goñi, M. Alías, P. Latorre, A. Viguera, R. Moreno-Loshuertos, P. Fernández-Silva, I. Usón, R. Hurtado-Guerrero, A. Velázquez-Campoy, M. Medina and J.A. Carrodegua. VIII BIFI National Conference. Zaragoza. January 31-February 2, 2017
12. Human Apoptosis Inducing Factor: from its molecular mechanism to its functional and pathological significance. P. Ferreira, R. Villanueva, S. Romero-Ramayo, M. Martínez-Júlvez, M. Medina. 19th International Symposium on Flavins and Flavoproteins: Groningen, Holanda. July 2-7, 2017
13. Mitochondrial and nuclear DNA matching shapes metabolism and healthy ageing. Raquel Moreno Loshuertos. Congreso: VIII National Conference BIFI 2017. 31 enero-2 febrero 2017
14. Colossus: Cloud computing CESAR infrastructure at the service of companies and researchers. Rubén Vallés. Congreso: VIII National Conference BIFI 2017. 31 de enero al 2 de febrero 2017
15. Quantum field theory on curved space- times. García Bondía. Journées de Physique. Mathématique, Institut Camille Jordan, Université Lyon 1, Lyon, France. Seminario en el LAPH, Universidad Annecy, Francia, marzo 2017
16. Wave Transport Through Disordered Media: Anderson and Anomalous Localizations Victor Gopar. Department of Physics, City University of New York at Queens College. 26/09/2017
17. Anderson and Anomalous localization of (EM & Matter) Waves. Victor Gopar. Department of Physics, University of Florida, Transport Through Disordered Media:. 07/10/2017

18. Lévy-disordered random media: Transport of (classical and quantum) anomalously localized waves. Victor Gopar. Graduate Center of the City University of New York. 12/05/2017.
19. The impact of human mobility on the spread of vector-borne diseases. Jesús Gómez Gardeñes. Netsci-X. 15-18 Enero, 2017. Tel-Aviv (Israel)
20. Evolutionary Games on Complex Networks. Jesús Gómez Gardeñes. Winter Workshop on Complex Systems 2017. 6-10 Febrero, 2017. Petnica (Serbia)
21. Markovian analysis of reaction-diffusion processes in complex metapopulations Jesús Gómez Gardeñes. International conference CROSSROADS 2017. 5-8 de Junio, 2017. Palma de Mallorca.
22. Structure and Dynamics of Complex Networks. Jesús Gómez Gardeñes. Tendencias en Analytics: Ciencia de Redes. 27 de Junio a 14 de Julio, 2017. Bogotá (Colombia)
23. Structure, Dynamics and Emergence in Complex Networks. Jesús Gómez Gardeñes. 3rd Workshop on Statistical Mechanics. 28 de Agosto a 1 de Septiembre, 2017. Bogotá (Colombia)
24. Human mobility and the spread of vector-borne diseases. Jesús Gómez Gardeñes. Conferencia: International conference ICAMI 2017. 26 de Noviembre a 1 de Diciembre, 2017. San Andrés (Colombia)
25. Reputation drives cooperative behavior and network formation in human groups. Carlos Gracia, Symposium Networks, Games and Human Behavior. Puebla, Mexico. 26 Septiembre 2017.
26. Dynamics of interacting disease. Sandro Meloni, IFISC, Palma de Mallorca, España. 22 Noviembre 2017.
27. Complex Networks: present and outlook. Sandro Meloni. IFISC, Palma de Mallorca, España. 22 Noviembre 2017.
28. Epidemic spreading on Networks: present and outlook. Sandro Meloni. Fourth Mediterranean School of Complex Networks. Salina, Italia, 3-8 Sept 2017.
29. Disease spreading processes through the lens of multilayer networks. Yamir Moreno, Workshop on Advances on Epidemics in Complex Networks. Delft University of Technology, The Netherlands. August 31-September 1, 2017.
30. A data-driven model for the assessment of age-dependent patterns of Tuberculosis burden and impact evaluation of novel vaccines. Yamir Moreno. Satellite "Contagion on Networks 2017" at the International School and Conference on Network Science, Indianapolis, USA, Jun 19-23, 2017.
31. DOOCN Satellite at NetSci'17, "Multilayer systems: from diffusion processes to transportation networks. Yamir Moreno. International School and Conference on Network Science, Indianapolis, USA, Jun 19-23, 2017.
32. Multilayer Networks in Biology: from the cellular to the population level. Yamir Moreno. Satellite "Network Medicine: Quantitative interactome and multilayer networks taking medicine beyond the genome" at the International School and Conference on Network Science, Indianapolis, USA, Jun 19-23, 2017.
33. Disease Spreading in Multilayer Networks. Yamir Moreno. International School and Conference on Network Science, Indianapolis, USA, Jun 19-23, 2017.
34. Geometric description of open quantum systems. J. Clemente-Gallardo. Physics and Geometry: remembering Giuseppe Morandi. 24-25 Noviembre 2017
35. Brief Reports on: (1) Control for Quantum Optics Processes; and (2) Propagators for the time-dependent Kohn-Sham equations. Alberto Castro. , Taller "Excited States: Electronic Structure and Dynamics", Telluride Science Research Center, Telluride, Colorado (USA), July 17th-21st 2017.
36. Glycomimetics targeting Glycosyltransferases. Ramón Hurtado-Guerrero. Dipartimento di Chimica. Università di Catania (Italia). 14 de Marzo de 2017

37. Revealing the Essence of Chemical Reactivity. Ramón Hurtado-Guerrero. Dipartimento di Chimica. Università di Pavia (Italia). 16 de Marzo de 2017
38. Chemical Challenges in Glycosyltransferase Modulation. Ramón Hurtado-Guerrero. CIC BIOMAGUNE. San Sebastian. 8 de Junio de 2017

Comunicaciones orales

1. Kinetics and thermodynamics in ligand binding as FMN production determinants in bifunctional FAD synthetases. M. Sebastian, A. Serrano, A. Velazquez-Campoy, M. Medina. Flavins 2017. Groningen, Julio 2017.
2. The intervening domain from MeCP2 enhances the DNA affinity of the methyl binding domain and provides an independent DNA interaction site. R. Claveria-Gimeno, P. Lanuza, I. Morales-Chueca, O.C. Jorge, S. Vega, O. Abian, M. Esteller, A. Velazquez-Campoy. XVI Congress of the Spanish Biophysical Society. Sevilla, Junio 2017
3. Homologous histone chaperones human SET/TAF-1 β and plant NRP1: Similarly inhibited by cytochrome c in cell nucleus. K. Gonzalez-Arzola, F. Rivero-Rodriguez, A. Diaz-Quintana, A. Cano-Gonzalez, A. Velazquez-Campoy, A. Lopez-Rivas, M.A. De la Rosa, I. Diaz-Moreno. XVI Congress of the Spanish Biophysical Society. Sevilla, Junio 2017
4. Molecular basis of the interaction of the human Apoptosis Inducing Factor with its nuclear partners. S. Romero-Tamayo, A. Velazquez-Campoy, M. Medina, P. Ferreira. XVI Congress of the Spanish Biophysical Society. Sevilla, Junio 2017
5. Blocking NUPR1 protein, a successful approach for pancreatic adenocarcinoma treatment. J.L. Neira, J. Bintz, M. Arruebo, B. Rizzuti, T. Bonacci, S. Vega, A. Lanas, A. Velazquez-Campoy, J.L. Iovanna, O. Abian. Digestive Disease Week DDW2017. Chicago, Mayo 2017
6. From antiapoptosis to detoxification: Stumblin' in!. S. Vega, G. Goñi, M. Alias, P. Latorre, A. Viguera, R. Moreno-Loshuertos, P. Fernandez-Silva, I. Uson, R. Hurtado-Guerrero, A. Velazquez-Campoy, M. Medina, J.A. Carrodegua. BIFI2017 - VIII National Conference. Zaragoza, Enero/Febrero 2017
7. The interplay between disordered regions and water molecules strongly influence the interaction between methyl-CpG binding protein 2 and DNA. R. Claveria-Gimeno, P.M. Lanuza, I. Morales-Chueca, O.C. Jorge, S. Vega, O. Abian, M. Esteller, A. Velazquez-Campoy. BIFI2017 - VIII National Conference. Zaragoza, Enero/Febrero 2017
8. Blocking NUPR1 protein, a successful approach for pancreatic adenocarcinoma treatment. Neira, J.L.; Bintz, J.; Arruebo, M.; Rizzuti, B.; Bonacci, T.; Vega, S.; Lanas, A.; Velázquez-Campoy, A.; Iovanna, J.; Abian, O. DDW 2017 (American Gastroenterology Society). Chicago, EEUU, 2017
9. Novel diagnosis and therapeutic strategies in chronic diseases. Abian O. RefBioII meeting. Toulouse, Francia. 2017
10. Nanoemulsion-based chitosan nanocapsules as antibiotic delivery system. Inés Serrano-Sevilla, Sonia García-Embid, Laura De Matteis, Ainhoa Lucía, José Antonio Ainsa, Jesús M. de la Fuente. EUROMAT 2017: European congress and exhibition on advanced materials and processes. Thessaloniki, Greece. 17-22 de septiembre 2017
11. The bactericidal and synergistic activity of the circular bacteriocin AS-48 against mycobacteria. Clara Aguilar, Begoña Gracia, Asunción Vitoria, Rubén Cebrián, Mercedes Maqueda, José Antonio Ainsa. II Reunión Científica MycoNET y X Reunión MycoSpain (MycoZar). 28 y 29 de septiembre 2017
12. The anti-tuberculosis drug bedaquiline is efficiently nanoencapsulated. A. Lucía, L. De Matteis, D. Jary, I. Serrano, S. García, F. Navarro, J. M. de la Fuente, J.A. Ainsa. II Reunión Científica MycoNET y X Reunión MycoSpain (MycoZar). 28 y 29 de septiembre 2017
13. Evolution of the nuclear and plastid pangenome: divergence vs introgression in the model grass *Brachypodium distachyon*. Catalan P., Contreras-Moreira B, Sancho R, Woods D., Amasino R., Gordon S., Vogel J., XIX International Botanical Congress. Shenzhen (China). 23-29/07/2017

14. The allotetraploid grass *Brachypodium hybridum*: an evolutionary dead-end or a newly emerging lineage? Catalán P., Contreras-Moreira B, Sancho R, Gordon S., Vogel J., XIX International Botanical Congress. Shenzhen (China). 23-29/07/2017
15. Contrasting dispersal histories of broad- and fine-leaved temperate Loliinae grasses: range expansion, founder events, and the roles of distance and barrier. Catalan P., Minaya M, Hackel J, Namaganda M, Brochmann C, Vorontsova M, Besnard G. XIX International Botanical Congress. Shenzhen (China). 23-29/07/2017
16. A kinetic and thermodynamic view of the protein-ligand interactions during the RFK activity of the FAD synthetase from *Corynebacterium ammoniagenes*. M. Sebastián, A. Serrano, A. Velázquez-Campoy, M. Medina. VIII BIFI National Conference. Zaragoza. January 31-February 2, 2017
17. Molecular basis of the interaction of the human Apoptosis Inducing Factor with its nuclear partners. S. Romero-Tamayo, A. Velázquez-Campoy, M. Medina, P. Ferreira. 16th Congress Spanish Biophysical Society. Sevilla. June 6-8, 2017
18. Estudio de fibroblastos de una paciente con mutaciones en el gen POLG. María Pilar Bayona, Sonia Emperador, Ester López, Carmen Hernandez, Paula Gaudó, Julio Montoya. Reunión científica del Programa de investigación de Medicina Mitochondrial y Neuromuscular del Centro de Investigación Biomédica en Red de enfermedades raras-CIBERER. Hospital San Joan de Déu. Barcelona. 12 diciembre 2017.
19. Multivalent combination of MTBVAC-based vaccines constructed in three widespread lineages of *Mycobacterium tuberculosis*. I. Pérez, C. Martín, J. Gonzalo-Asensio. FEMS Microbiology Congress 2017. Valencia. 09-07-2017 a 13-07-2017
20. Understanding the Factors Controlling the Oxidative Addition of Ammonia N-H Bond to Ir(I) PXP Pincer Complexes. Polo Ortiz, Victoriano. XXXVI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química, Sitges, España, 25/06/2017.
21. A data-driven model for the assessment of age-dependent patterns of Tuberculosis burden and impact evaluation of novel vaccines. Sergio Arregui. Conference on Complex Systems 2017, Cancún, Mexico. 18-22 Septiembre.
22. Emergence of consensus as a modular-to-nested transition in communication dynamics. Carlos Gracia. Conference on Complex Systems 2017, Cancún, Mexico. 18-22 Septiembre 2017.
23. Dynamic social conflict in the Axelrod model. Carlos Gracia. Workshop Evolution of Cultural Complexity. Cancun, Mexico. 21 Septiembre 2017.
24. Coexistence of multiple public goods in a bacterial colony. Carlos Gracia. "LaNet: Latin American Conference on Complex Networks. Puebla, Mexico. 26 Septiembre 2017.
25. Emergence of consensus as a modular-to-nested transition in communication dynamics. Carlos Gracia. Workshop on Computational Social Science and Complexity, from Socio-Physics to Data-Driven Research. Cancun, Mexico. 20 Septiembre 2017.
26. Dynamic social conflict in the Axelrod model. Carlos Gracia. 3rd Workshop COMSOTEC, Madrid. 26-28, Abril 2017
27. A Multilayer perspective for the analysis of urban transportation systems. Alberto Aleta. Conference on Complex Systems 2017, Cancún, México. 18-22 Septiembre.
28. Human mobility network and persistence of multi-strain diseases. Alberto Aleta. LaNet: Latin American conference on Complex Networks. Puebla, Mexico. 26 Septiembre
29. Comportamiento de las audiencias en redes sociales: Análisis de Facebook y Twitter para el caso de las televisiones autonómicas. Iñiguez, D. Latorre, P. Orive, V. VI Congreso Internacional de Investigadores Audiovisuales. Madrid, España. Abril 2017
30. Deciphering the action mechanism of Fur homolog from the pathogen *Clostridium difficile*. Fernández-Otal A, Peleato ML, Fillat MF, Lanas A and Bes MT. BIFI 2017. Zaragoza (España). Enero 2017

31. Asymmetric 1,3-dipolar cycloadditions catalyzed by a new imidazolidinone organocatalyst. V. Algeri, A. de Nino, L. Maiuolo, B. Russo, P. Merino. Libro de resúmenes. XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana. Paestum (Italia). Fecha: 10-14 de Septiembre de 2017

Posters

V. Calvo Sein-Echaluce, I. Yruela, A. Velazquez-Campoy, M.T. Bes, M.L. Peleato, M.F. Fillat
Redox status of C93 in FurB from *Anabaena* sp. PCC 7120 modulates binding of regulatory zinc and its interaction with target DNA

Póster

FEMS 2017 - 7th Congress of European Microbiologists

Valencia, Julio 2017

M. Sebastian, E. Lira-Navarrete, A. Serrano, C. Marcuello, A. Velazquez-Campoy, A. Lostao, R. Hurtado-Guerrero, M. Medina, M. Martinez-Julvez

The FAD synthetase from *Streptococcus pneumoniae*: An enzyme exhibiting activity-dependent redox requirements

Póster

Flavins 2017

Groningen, Julio 2017

A. Guerra-Castellano, A. Diaz-Quintana, R. Del Conte, S.M. Garcia-Mauriño, S. Diaz-Moreno, K. Gonzalez-Arzola, C. Santos-Ocaña, P.M. Nieto, A. Velazquez-Campoy, M.A. De la Rosa, P. Turano, I. Diaz-Moreno

Mitochondrial dysfunction in response to cytochrome c phosphorylation at position 48

Póster

XVI Congress of the Spanish Biophysical Society

Sevilla, Junio 2017

M. Sebastian, A. Serrano, A. Velazquez-Campoy, M. Medina

Kinetics and thermodynamics in the protein-ligand interactions during activity in the bifunctional FAD synthetase from *Corynebacterium ammoniagenes*

Póster

XVI Congress of the Spanish Biophysical Society

Sevilla, Junio 2017

C.A. Elena-Real, A. Diaz-Quintana, K. Gonzalez-Arzola, A. Velazquez-Campoy, S. Gil-Caballero, I. Diaz-Moreno, M.A. De la Rosa

Molecular basis for the interaction between cytochrome c and its novel apoptotic target 14-3-3 ϵ

Póster

XVI Congress of the Spanish Biophysical Society

Sevilla, Junio 2017

M. Sebastian, E. Lira-Navarrete, A. Serrano, C. Marcuello, A. Velazquez-Campoy, A. Lostao, R. Hurtado-Guerrero, M. Medina, M. Martinez-Julvez

The bifunctional FAD synthetase of the human pathogen *Streptococcus pneumoniae*

Póster

BIFI2017 - VIII National Conference

Zaragoza, Enero/Febrero 2017

S. Romero-Tamayo, A. Velazquez-Campoy, M. Medina, P. Ferreira

Study of the interaction between human apoptosis inducing factor (hAIF) and its nuclear partners

Póster

BIFI2017 - VIII National Conference

Zaragoza, Enero/Febrero 2017

Screening of FDA-approved drugs library identifies potential inhibitors against *Helicobacter pylori* ArsR essential regulator

Póster

BIFI2017 - VIII National Conference

Zaragoza, Enero/Febrero 2017

A. Gonzalez, A. Fernandez-Otal, A. Velazquez-Campoy, J. Sancho, A. Lanas, M.F. Fillat

Targeting the ferric uptake regulator (Fur) for identification of potential novel drugs against *Pseudomonas aeruginosa*

Póster

BIFI2017 - VIII National Conference

Zaragoza, Enero/Febrero 2017

J.L. Neira, J. Bintz, M. Arruebo, B. Rizzuti, T. Bonacci, S. Vega, A. Lanas, A. Velazquez-Campoy, J.L. Iovanna, O. Abian

Identifying small compounds inhibiting protein-protein interactions involving intrinsically disordered proteins: A multiple challenge

Póster

BIFI2017 - VIII National Conference

Zaragoza, Enero/Febrero 2017

Neira, JL; Bintz,J; Arruebo,M;Rizzuti,B;Bonacci,T;Vega, S ;Lanas, A;Velázquez-Campoy, A;Iovanna, J; Abian, O "Identifying small compounds inhibiting protein-protein interactions involving intrinsically disordered proteins: a multiple challenge"

Poster

BIFI2017 VIII National Conference

Zaragoza, 2017

Neira, JL; Bintz,J; Arruebo,M;Rizzuti,B;Bonacci,T;Vega, S ;Lanas, A;Velázquez-Campoy, A;Iovanna, J; Abian, O "Identifying small compounds inhibiting protein-protein interactions involving intrinsically disordered proteins: a multiple challenge"

Poster

BIFI2017 VIII National Conference

Zaragoza, 2017

Clara Aguilar, Begoña Gracia, Asunción Vitoria, Rubén Cebrián, Mercedes Maqueda, José Antonio Aínsa.

Activity of circular bacteriocin AS-48 against mycobacteria

National Conference BIFI 2017, Zaragoza, Spain.

Poster

31 enero a 2 febrero 2017

Laura De Matteis, Dorothée Jary, Ainhoa Lucía, Inés Serrano, Sonia García, Fabrice Navarro, Jesús M. de la Fuente, and José Antonio Ainsa.

Bedaquiline, anti MDR-TB drug, is efficiently nanoencapsulated.

VIII National Conference BIFI 2017, Zaragoza, Spain.

Poster

31 enero a 2 febrero 2017

S. Salillas, M. Alías, V. Michel, J. Bueno, J. Arribas, A. Lucía, L. Rodrigues, A. Mahía, C. Sostres, J. A. Aínsa, J. Castillo, M.D. Díaz-de-Villegas, A. Lanas, E. Touat, J. Sancho.

A new approach for *Helicobacter pylori* eradication: In vivo assessment of novel flavodoxin inhibitors efficacy

National Conference BIFI 2017, Zaragoza, Spain.

Poster

31 enero a 2 febrero 2017

Ernesto Anoz-Carbonell, AinhoaLucía, María Sebastián, Sandra Salillas, Javier Sancho, José Antonio Aínsa, Milagros Medina

Old drugs, new uses. Novel compounds targeting the prokaryotic FAD synthetases

National Conference BIFI 2017, Zaragoza, Spain.

Poster

31 enero a 2 febrero 2017

A. Lucía, L. De Matteis, D. Jary, I. Serrano, S. García, F. Navarro, J. M. de la Fuente, J.A. Ainsa
 The anti-tuberculosis drug bedaquiline is efficiently nanoencapsulated.
 FEMS 2017: 7th Congress of European Microbiologists, Valencia.
 Poster
 9 – 13 julio 2017

C. Aguilar, B. Gracia, A. Vitoria, A. Lucia, R. Cebrian, M. Maqueda, J. Ainsa
 Bacteriocins against mycobacteria: the case of circular peptide AS-48
 FEMS 2017: 7th Congress of European Microbiologists, Valencia.
 Poster
 9 – 13 julio 2017

Scouting new antimicrobials: the fad synthetase as a novel promising target
 E. Anoz-Carbonell, A. Lucía, M. Sebastián, S. Salillas, J. Sancho, J.A. Ainsa, M. Medina
 FEMS 2017: 7th Congress of European Microbiologists, Valencia.
 Poster
 9 – 13 julio 2017

Catalan P., Contreras-Moreira B, Sancho R, Woods D., Amasino R., Gordon S., Vogel J.,
 Comparative plastome genomics and phylogenomics of *Brachypodium*: flowering time signatures,
 introgression and recombination in recently diverged ecotypes
 XIX International Botanical Congress
 Poster
 Shezhen (China)

Catalan P, Shiposha V, Olonova M, Marques I.
 Different colonization routes explain the genetic structure and diversity of the model grass *Brachypodium stacei* in the Western Mediterranean
 XIX International Botanical Congress
 Poster
 Shenzhen (China), 2017

López-Álvarez D, Zubai H, Beckmann M, Draper J, Catalan P.
 Diversity and association of phenotypic and metabolomic traits in the close model grasses *Brachypodium distachyon*, *B. stacei* and *B. hybridum*.
 XIX International Botanical Congress
 Poster
 Shenzhen (China), 2017

Marques I, Draper D, López-Herrans MI, Garnatje T, Segarra-Moragues Jg, Catalan P.
 Past climate changes facilitated homoploid speciation in three mountain spiny fescues (*Festuca*, Poaceae)
 XIX International Botanical Congress
 Poster
 Shenzhen (China), 2017

Arnelas I, Perez-Collazos E, Devesa Ja, López E, Catalan P.
 Updated phylogeny and divergence time estimations of *Centaurea* sects. *Centaurea*, *Jacea*, *Leptanthus*
 and *Phalolepis* (Asteraceae).
 XIX International Botanical Congress
 Poster
 Shenzhen (China), 2017

Sancho R, Contreras-Moreira B, Des Marais D, Gordon S, Vogel J, Catalan P.
 Phylogenomics and gene evolution in model annual and perennial *Brachypodium* species.
 3rd International Brachypodium Conference
 Poster
 Beijing (China), 2017

Marques I, Shiposha V, López-Álvarez D, Manzaneda A, Hernández P, Olonova M, Catalan P.
 Environmental isolation explains Iberian genetic diversity in the highly homozygous model grass
Brachypodium distachyon
 3rd International Brachypodium Conference
 Beijing (China), 2017

López-Álvarez D, Zubai H, Beckmann M, Draper J, Catalan P,
Phenotypic and metabolomic variation in the model annual grass trio (*Brachypodium distachyon*, *B. stacei*,
B. hybridum).

3rd International Brachypodium Conference
Beijing (China), 2017

R. Burbano, J. Seco, M.C. Daza, M. Doerr, M. Medina, I. Lans
Study of the catalytic mechanism of the adenylylation of FMN in the bifunctional FAD synthetase from
Corynebacterium ammoniagenes

VIII BIFI National Conference

Póster

Zaragoza, January 31-February 2, 2017

M. Sebastián, E. Lira-Navarrete, A. Serrano, C. Marcuello, A. Velázquez-Campoy, A. Lostao, R. Hurtado-
Guerrero, M. Medina, M. Martínez-Júlvez

The bifunctional FAD synthetase of the human pathogen *Streptococcus pneumoniae*

VIII BIFI National Conference

Poster

Zaragoza, January 31-February 2, 2017

S. Romero-Tamayo, A. Velázquez-Campoy, M. Medina, P. Ferreira

Study of the interaction between human Apoptosis Inducing Factor (hAIF) and its nuclear partners.

VIII BIFI National Conference

Póster

Zaragoza, January 31-February 2, 2017

V. Taleb Seral, M. Medina, P. Leone, M. Barile, A. Lostao, M. Martínez-Júlvez.

3D structure prediction and AFM morphology study of human FAD synthase (isoform 2).

VIII BIFI National Conference

Poster

Zaragoza, January 31-February 2, 2017

E. Anoz-Carbonell, A.L. Quintana, M. Sebastián, S. Salillas, J. Sancho, J.A. Aínsa, M. Medina

Old drugs, new uses. Novel compounds targeting the prokaryotic FAD synthetases

VIII BIFI National Conference

Poster

Zaragoza, January 31-February 2, 2017

R. Villanueva, J. Martínez-Oliván, J. Sancho, P. Ferreira, M. Medina

Spectroscopic insights into the stability of Apoptosis Inducing Factor

VIII BIFI National Conference

Poster

Zaragoza, January 31-February 2, 2017

J. Carro, M. Martínez-Júlvez, M. Medina, A. T. Martínez, P. Ferreira

Protein Motions Promote Hydride Tunneling in the Reduction of Aryl-Alcohol Oxidase

VIII BIFI National Conference

Poster

Zaragoza, January 31-February 2, 2017

G. Goñi, M.M. Koskela, N. Lehtimäki, P. Mulo, M. Medina

Insights into apotential chloroplast NADPH dependent flavoreductase in stroma from *Arabidopsis thaliana*

VIII BIFI National Conference

Poster

Zaragoza, January 31-February 2, 2017

M. Martínez-Júlvez, G. Goñi, I. Ionescu, M.L. Tondo, S. Petrocelli, G. Orellano, M. Medina

Discovery of inhibitors of the ferredoxin-NADP⁺ reductase from the *Xantomonas citri* subsp. *citri*
phytopatoghen.

16th Congress Spanish Biophyscial Society

Póster

Sevilla, June 6-8, 2017

M. Sebastián, A. Serrano, A. Velázquez-Campoy, M. Medina
 Kinetics and thermodynamics in the protein-ligand interactions during activity in the bifunctional FAD synthetase from *Corynebacterium ammoniagenes*
 16th Congress Spanish Biophysical Society
 Póster
 Sevilla, June 6-8, 2017

M. Sebastián, E. Lira-Navarrete, A. Serrano, C. Marcuello, A. Velázquez-Campoy, A. Lostao, R. Hurtado-Guerrero, M. Medina, M. Martínez-Júlvez
 The FAD synthetase from *Streptococcus pneumoniae*: an enzyme exhibiting activity-dependent redox requirements
 19th International Symposium on Flavins and Flavoproteins
 Poster
 Groningen, Holanda. July 2-7, 2017

E. Anoz-Carbonell, A.L. Quintana, M. Sebastián, S. Salillas, J. Sancho, J.A. Aínsa, M. Medina
 Scouting new antimicrobials: the FAD synthetase as a novel promising target
 FEMS 2017. 7th congress of European microbiologist
 Poster
 Valencia, July 9-13, 2017

Emma Sevilla, Carolina Castro, Cristina Sarasa, Mar.a Teresa Bes, Mar.a F. Fillat, María Luisa
Microcystis aeruginosa PCC7806 induces linE homologue in the presence of γ -lindane
 5-ClC. 5º Congreso Iberico de Cianotoxinas
 Póster
 Lugo (España) Julio 2017

Calvo Sein-Echaluce V, Yruela I, Velázquez-Campoy A, Bes MT, Peleato ML, Fillat MF
 Redox status of C93 in FurB from *Anabaena* sp. PCC 7120 modulates binding of regulatory zinc and its interaction with target DNA
 Póster
 FEMS 2017, 7th Congress of European Microbiologists.
 Valencia (España). Julio 2017

Landeros Sánchez B, Ibarra Molina G, Gutiérrez-Pabello JL, Hurtado Ayala LA, Brito Perea MDC, Fernández-Otal A, Fillat MF
 Biochemical and functional analysis of the recombinant Zur MAP3773c of *Mycobacterium avium* subsp. *paratuberculosis*
 Póster
 FEMS 2017, 7th Congress of European Microbiologists.
 Valencia (España). Julio 2017

Sevilla E, Sarasa C, Broset E, Cases R, Peleato ML, Fillat MF
 FurC overexpression leads to variations in the composition and efficiency of photosynthetic apparatus in *Anabaena* PCC 7120
 Póster
 FEMS 2017, 7th Congress of European Microbiologists.
 Valencia (España). Julio 2017

Sevilla E, Sarasa C, Broset E, Fillat MF, Peleato ML
 New insights into the role of FurC in nitrogen metabolism and heterocyst differentiation
 Póster
 FEMS 2017, 7th Congress of European Microbiologists.
 Valencia (España). Julio 2017

Sarasa C, Sevilla E, Castro C, Fillat MF, Peleato ML
 Transcriptional analysis of gamma-lindane induced changes in *Microcystis aeruginosa* PCC7806 and *Anabaena* PCC 7120
 Póster
 FEMS 2017, 7th Congress of European Microbiologists.
 Valencia (España). Julio 2017

Fernández-Otal A, Peleato ML, Fillat MF, Lanas A and Bes MT
 DNA-binding activity of *Clostridium difficile* FUR depends on its cysteines redox state
 Póster
 FEMS 2017, 7th Congress of European Microbiologists.
 Valencia (España). Julio 2017

Sevilla E, Abizanda S, Fillat, MF, Navarro, E., Peleato ML
 Degradación de isómeros de lindano por la cianobacteria *Anabaena* PCC 7120
 Póster
 XIV Congreso Español y IV Congreso Iberoamericano de Salud Ambiental.
 Zaragoza (España). Junio 2017

Fernández-Otal A, Peleato ML, Fillat MF, Lanas A and Bes MT
 Deciphering the action mechanism of Fur homolog from the pathogen *Clostridium difficile*
 Póster
 BIFI 2017.
 Zaragoza (España). Enero 2017

González A, Fernández-Otal A, Velázquez-Campoy A, Sancho J, Lanas A, Fillat MF
 Targeting the ferric uptake regulator (Fur) for identification of potential novel drugs against *Pseudomonas aeruginosa*
 Póster
 BIFI 2017.
 Zaragoza (España). Enero 2017

González A, Morán J, Velázquez-Campoy A, Sancho J, Fillat MF, Lanas A
 Screening of FDA-approved drugs library identifies potential inhibitors against *Helicobacter pylori* ArsR essential regulator
 Póster
 BIFI 2017.
 Zaragoza (España). Enero 2017

Sarasa C, Sevilla E, Broset E, Peleato ML, Fillat MF
 FurC controls key genes involved in cyanobacterial nitrogen metabolism and affects heterocyst differentiation
 Póster
 BIFI 2017.
 Zaragoza (España). Enero 2017

Sevilla E, Sarasa C, Broset E, Cases R, Peleato ML, Fillat MF
 Overexpression of FurC produces changes in the pigment composition and yield of photosynthetic apparatus in *Anabaena* PCC 7120
 Póster
 BIFI 2017.
 Zaragoza (España). Enero 2017

Caridad Díaz-Navarro, José Pérez-del Palacio, Patricia Mena, Antonio Sánchez Pozo, Olga Genilloud, Carlos Martín, Francisca Vicente, Jesús Gonzalo-Asensio
 Comparative metabolomic analysis between MT103 *Mycobacterium tuberculosis* and MTBVAC a tuberculosis vaccine candidate
 Poster
 FEMS Microbiology Congress 2017
 Valencia, 09-07-2017 a 13-07-2017

Esther Broset. Carlos Martín, Jesús Gonzalo-Asensio
 Attenuated *Mycobacterium tuberculosis* vaccine secreting DTP antigens: basis for a multivalent protection
 Poster
 FEMS Microbiology Congress 2017
 Valencia, 09-07-2017 a 13-07-2017

A.Fiasconaro, A. E. Bergues Pupo, F. Falo.
 Role of the central ion in the telomeric G-quadruplex: Simulations at micro and mesoscopic level
 Biology for Physics: Is there new physics in living matter?
 Póster
 Barcelona, 15-18 de enero de 2017

R. Tapia-Rojo, J. J. Mazo, and F. Falo

“Thermal versus mechanical unfolding of a model protein: Free energy profiles, configurational networks and folding pathways”

Biology for Physics: Is there new physics in living matter?

Póster

Barcelona, 15-18 de enero de 2017

R. Tapia-Rojo, C. Marcuello, A. Lostao, C. Gómez-Moreno, J. J. Mazo, and F. Falo.

“Physical picture for the mechanical dissociation of biological complexes”

Biology for Physics: Is there new physics in living matter?

Póster

Barcelona, 15-18 January, 2017

Pablo J. Blasco-Hernández, Pierpaolo Bruscolini and Fernando Falo

“Tissue and cell pattern formation through the Delta-Notch mechanism of cellular differentiation”

VIII National Conference BIFI 2017,

Póster

Zaragoza, Spain, January 31- February 2, 2017.

Guillermo Díez-Señorans, Rafael Tapia-Rojo, Fernando Falo

“Molecular motors modeling: helicase model”

VIII National Conference BIFI 2017,

Póster

Zaragoza, Spain, January 31- February 2, 2017.

R. Tapia-Rojo, C. Marcuello, A. Lostao, C. Gómez-Moreno, J.J. Mazo, y F. Falo.

“Physical picture for mechanical dissociation of biological complexes”

XXI Congreso Nacional de Física Estadística.

Póster

Sevilla España. 30 Marzo a 1 de Abril de 2017.

R. Tapia-Rojo, J. J. Mazo, y F. Falo.

“Thermal versus Mechanical Unfolding of a Model Protein: Free Energy Profiles, Configurational Networks and Folding Pathways”

Póster

XXI Congreso Nacional de Física Estadística, Sevilla España.

30 Marzo a 1 de Abril de 2017.

Alessandro Fiasconaro, Juan J. Mazo, y Fernando Falo.

“Simulations of active polymer translocation”.

Póster

XXI Congreso Nacional de Física Estadística, Sevilla España. 30 Marzo a 1 de Abril de 2017.

Felipe Maciel Cardoso,

“Topical homophily in online social systems”, COSTNET17.

Poster

Palma de Mallorca, España. 25 Octubre.

Agnieszka Czaplicka

“Symmetric threshold model”

Crossroads in Complex Systems conference.

Poster

Palma de Mallorca, España 5-8 Junio.

Emma Sevilla, Carolina Castro, Cristina Sarasa, María Teresa Bes, María F. Fillat, María Luisa

Microcystis aeruginosa PCC7806 induces linE homologue in the presence of γ -lindane

5-ClC. 5º Congreso Iberico de Cianotoxinas

Poster

Lugo (España). Julio 2017

Calvo Sein-Echaluce V, Yruela I, Velázquez-Campoy A, Bes MT, Peleato ML, Fillat MF

Redox status of C93 in FurB from *Anabaena* sp. PCC 7120 modulates binding of regulatory zinc and its interaction with target DNA

FEMS 2017, 7th Congress of European Microbiologists.

Poster

Valencia (España). Julio 2017

Fernández-Otal A, Peleato ML, Fillat MF, Sancho J, Lanas A and Bes MT

High-throughput screening for modulators of *Clostridium difficile* Fur activity
FEMS 2017, 7th Congress of european Microbiologists.
Valencia (España). Julio 2017

Fernández-Otal A, Peleato ML, Fillat MF, Lanas A and Bes MT
DNA-binding activity of *Clostridium difficile* Fur depends on its cysteines redox state
FEMS 2017, 7th Congress of european Microbiologists.
Valencia (España). Julio 2017

L. Maiuolo, A. De Nino, V. Algieri, B. Russo, M. Nardi, M. A. Tallarida, I. Delso and P. Merino
Synthesis of isoxazolidinyl-gem-bisphosphonic acids and study of protein-ligands interactions (L. Maiuolo)
Publicación: Libro de resúmenes
XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana
Paestum (Italia)
10-14 de Septiembre de 2017

ANEXO 3. Congresos, conferencias, cursos y jornadas organizados por el BIFI y organización de conferencias en las que participan Investigadores de otros centros de investigación

Título: BIFI-Talks 2017

Duración: todo el año, un seminario al mes

Fecha y Lugar de celebración: Edificio I+D, Campus Río Ebro.

Título: XVI Congreso de la SBE. Comité científico y Presidente de sesión

Duración: 3 días

Fecha y Lugar de celebración: 2017, Sevilla (España)

Título: Genetic interpretation of rare diseases: from mutation to patient

Duración: 2 días

Fecha y Lugar de celebración: 2017, Baracaldo (España)

Título: II Reunión Científica MycoNET y X Reunión MycoSpain (MycoZar)

Duración: 2 días

Fecha y Lugar de celebración: 28 y 29 de septiembre 2017, CaixaForum-Zaragoza

Título: 19th Symposium on Flavins and Flavoproteins. M. Medina como parte del Comité Científico

Duración: 5 días

Fecha y Lugar de celebración: Groningen, Holanda, 2-7 Julio del 2017

Título: VIII National Conference BIFI 2017. P. Ferreira como parte del Comité Organizador

Duración: 3 días

Fecha y Lugar de celebración: Zaragoza, España, 31 de enero-2 febrero del 2017

Título: Latin American Conference on Complex Networks, LANET'17

Duración: 5 días

Fecha y Lugar de celebración: 25-29 de Septiembre 2017, Puebla (México).

Título: School on Kinetics and Dynamics of Chemical Reactions

Duración: 5 días

Fecha y Lugar de celebración: 20-24 de Marzo, ZCAM.

Título: School on Quantum and Mixed Quantum Classical Dynamics Simulations for the Study of Photo-Initiated Processes

Duración: 5 días

Fecha y Lugar de celebración: 27-31 de Marzo, ZCAM

Título: School on Theoretical Solid State Chemistry: Theory, Modeling and Simulation

Duración: 5 días

Fecha y Lugar de celebración: 8-12 de Mayo, ZCAM

Título: School on Computational Biochemistry

Duración: 5 días

Fecha y Lugar de celebración: 15-19 de Mayo, ZCAM

Título: WaterSpain

Duración: 2 días

Fecha y Lugar de celebración: 6-7 de Julio, ZCAM

Título: Theoretical Methods in Quantum Chemistry

Duración: 5 días

Fecha y Lugar de celebración: 2-6 de Octubre, ZCAM.

ANEXO 4. Centros de investigación colaboradores con BIFI

Colaboraciones internacionales

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Florencia (Italy)

Investigador colaborador: Prof. Fabrizio Chiti

Investigador del BIFI que colabora: Nunilo Cremades

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Colaboración dentro del marco del proyecto "Bases moleculares y determinantes estructurales de toxicidad celular de la agregación amiloide en la enfermedad de Parkinson".

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University College London (UK)

Investigador colaborador: Dr. Alfonso de Simone

Investigador del BIFI que colabora: Nunilo Cremades

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Colaboración dentro del marco del proyecto "Bases moleculares y determinantes estructurales de toxicidad celular de la agregación amiloide en la enfermedad de Parkinson".

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Alabama (USA)

Investigador colaborador: Dr. Laura Volpicelli-Daley

Investigador del BIFI que colabora: Nunilo Cremades

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Colaboración dentro del marco del proyecto "Defining alpha-synuclein conformers responsible for Parkinson's disease phenotypes in mice".

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Cambridge University (UK)

Investigador colaborador: Prof. Chris Dobson

Investigador del BIFI que colabora: Nunilo Cremades

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Colaboración dentro del marco del proyecto "Bases moleculares y determinantes estructurales de toxicidad celular de la agregación amiloide en la enfermedad de Parkinson".

Centro de investigación/Departamento/Unidad: ETH Zurich (Switzerland)

Investigador colaborador: Prof. Paola Picotti

Investigador del BIFI que colabora: Nunilo Cremades

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Colaboración dentro del marco del proyecto "Bases moleculares y determinantes estructurales de toxicidad celular de la agregación amiloide en la enfermedad de Parkinson".

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Northwestern University (USA)

Investigador colaborador: Dr. Joseph Mazzulli

Investigador del BIFI que colabora: Nunilo Cremades

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Colaboración dentro del marco del proyecto "Bases moleculares y determinantes estructurales de toxicidad celular de la agregación amiloide en la enfermedad de Parkinson".

Centro de investigación/Departamento/Unidad: São Paulo State University (UNESP), Department of Physics and Biophysics

Investigador colaborador: Marcos R.M. Fontes

Investigador del BIFI que colabora: Adrián Velázquez Campoy

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio de interacciones proteína-proteína en procesos de traslocación nuclear celular

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Centre de Recherche en Cancérologie de Marseille (France)

Investigador colaborador: Juan Iovanna

Investigador del BIFI que colabora: Adrián Velázquez Campoy

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Identificación de compuestos bioactivos frente a NUPR1, proteína implicada en cáncer pancreático

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Maryland (USA)

Investigador colaborador: Frank T. Robb

Investigador del BIFI que colabora: Adrián Velázquez Campoy

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio de estabilidad estructural de chaperonas oligoméricas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: National University of Singapore, Department of Biological Sciences (Singapore)

Investigador colaborador: Jayaraman Sivaraman

Investigador del BIFI que colabora: Adrián Velázquez Campoy

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio de interacciones proteína-proteína

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Victoria, Department of Biochemistry & Microbiology (Canadá)

Investigador colaborador: Juan Ausio

Investigador del BIFI que colabora: Adrián Velázquez Campoy

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio de interacciones proteína-DNA en MeCP2, proteína implicada en síndrome de Rett

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Georgia (USA)

Investigador colaborador: Robert Haltiwanger

Investigador del BIFI que colabora: Ramón Hurtado-Guerrero

Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Copenhagen/Medicine Department (DK)

Investigador colaborador: Henrik Clausen

Investigador del BIFI que colabora: Ramón Hurtado-Guerrero

Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Simon Fraser University Copenhagen/Department of Chemistry (DK)

Investigador colaborador: David Voadlo

Investigador del BIFI que colabora: Ramón Hurtado-Guerrero

Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Kansas State University/College of Veterinary Medicine (USA)

Investigador colaborador: Philip Hardwidge

Investigador del BIFI que colabora: Ramón Hurtado-Guerrero

Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Dundee/ Molecular Microbiology (UK)

Investigador colaborador: Daan van Aalten

Investigador del BIFI que colabora: Ramón Hurtado-Guerrero

Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Case Western University/Pediatrics (USA)

Investigador colaborador: Tom Gerken

Investigador del BIFI que colabora: Ramón Hurtado-Guerrero

Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Institut Pasteur (Lille, Francia)

Investigador colaborador: Priscille Brodin

Investigador del BIFI que colabora: José A. Ainsa

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Actividad intracelular de fármacos en M. tuberculosis. Nanopartículas como terapia antimicrobiana.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Institut Pasteur (Lille, Francia)

Investigador colaborador: Ruben Hartkoorn

Investigador del BIFI que colabora: José A. Ainsa

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Implicación de eflujo en resistencia a compuestos antimicrobianos frente a M. tuberculosis

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Comenius University (Bratislava, Eslovaquia)

Investigador colaborador: Katarina Mikusova

Investigador del BIFI que colabora: José A. Ainsa

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio de TrxR como diana de fármacos en M. tuberculosis

Centro de investigación/Departamento/Unidad: École Polytechnique Fédérale de Lausanne (Lausana, Suiza)

Investigador colaborador: Rita Skelezy

Investigador del BIFI que colabora: José A. Ainsa

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Actividad antituberculosis de compuestos y susceptibilidad a eflujo.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Indian Institute of Science (Bangalore, India)

Investigador colaborador: Valakunja Nagaraja

Investigador del BIFI que colabora: José A. Aínsa

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Sistema genético para evaluación de inhibidores de la topoisomerasa de *M. tuberculosis*.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Institut Pasteur (París, Francia)

Investigador colaborador: Brigitte Gicquel

Investigador del BIFI que colabora: José A. Aínsa

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Descubrimiento de nuevos compuestos con actividad antimicrobiana

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Joint Genome Institute (DoE, USA)

Investigador colaborador: John Vogel

Investigador del BIFI que colabora: Pilar Catalan, Antonio Díaz, Rubén Sancho

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Secuenciación y análisis evolutivos de genomas de *Brachypodium*

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Massachusetts Institute of Technology (MIT, USA)

Investigador colaborador: David Des Marais

Investigador del BIFI que colabora: Pilar Catalan, Rubén Sancho

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Secuenciación y análisis evolutivos de transcriptomas de *Brachypodium*

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Tomsk State University (Russia)

Investigador colaborador: Marina Olonova

Investigador del BIFI que colabora: Pilar Catalán

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudios sistemáticos, genéticos y evolutivos de gramíneas eurosiberianas.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Hertfordshire (UK)

Investigador colaborador: Cristina Barrero-Sicilia

Investigador del BIFI que colabora: Pilar Catalán

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Análisis de transcriptomas y proteomas de semillas en especies modelo anuales de *Brachypodium*.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Shahrekord University (Iran)

Investigador colaborador: Majid Sharifi-Tehrani

Investigador del BIFI que colabora: Pilar Catalán

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudios genéticos de especies modelo de *Brachypodium* en Irán.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Grand Canyon University (USA)

Investigador colaborador: Galyna Kufyck

Investigador del BIFI que colabora: María F. Fillat, Emma Sevilla y Cristina Sarasa

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Valoración del PSII en mutantes de sobreexpresión de FurC de *Anabaena*

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Centre de Recherche des Cordeliers, Paris, (France)

Investigador colaborador: Dr. Santos Susin.

Investigador del BIFI que colabora: Patricia Ferreira Milagros Medina

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: colaboración para el estudio a nivel molecular y celular de las funciones de hAIF.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Nacional de Rosario, Rosario, (Argentina)

Investigador colaborador: Eduardo Ceccarelli, Elena Orellano

Investigador del BIFI que colabora: Milagros Medina y Marta Martínez

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Investigación conjunta en FPRs Bacterianas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universitat degli Studi di Bari, Bari, (Italia)

Investigador colaborador: Dra. Maria Barile

Investigador del BIFI que colabora: Milagros Medina y Marta Martínez

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Caracterización del efecto de inhibidores de FADSs bacterianas en la FADS humana.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Faculdade de Ciencias Farmaceuticas de Ribeirao Preto. Universidade de Sao Paulo. (Brasil)

Investigador colaborador: Dra. Cristina Nonato.

Investigador del BIFI que colabora: Patricia Ferreira, Milagros Medina

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio del mecanismo catalítico de la flavoenzima dihidroorotato dehidrogenasa de Leishmania major con objeto de estudiar el efecto de algunas mutaciones e inhibidores de esta enzima.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Wageningen (Países Bajos)

Investigador colaborador: Dr. Willem van Berkel.

Investigador del BIFI que colabora: Patricia Ferreira, Marta Martínez y Milagros Medina

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Caracterización cinética y estructural de la flavoenzima prolina dehidrogenasa de Thermus thermophilus.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Turku (Finlandia)

Investigador colaborador: Dr. Paula Mulo

Investigador del BIFI que colabora: Milagros Medina

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Caracterización proteínas FNR-like

Centro de investigación/Departamento/Unidad: INRA, AIX Marseille Université (Francia)

Investigador colaborador: Eric Record

Investigador del BIFI que colabora: Patricia Ferreira

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Caracterización de nuevas oxidorreductasas implicadas en la conversión enzimática de la biomasa vegetal.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Grupo de Bioquímica Teórica, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, (Colombia)

Investigador colaborador: Dr. Isaías LansInvestigador del BIFI que colabora: Milagros Medina

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Caracterización computacional de los mecanismos de acción de FAD sintetasas bacterianas.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Centro Atómico de Bariloche (Argentina)

Investigador colaborador: Sebastián Bouzat

Investigador del BIFI que colabora: Fernando Falo

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Transporte intracelular.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: City University of New York (USA)

Investigador colaborador: Azriel Genack

Investigador del BIFI que colabora: Víctor A. Gopar

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Transporte de ondas a través de medios desordenados

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Department of Physics, National Taiwan University (Taiwan).

Investigador colaborador: Ioannis Klefogiannis

Investigador del BIFI que colabora: Víctor A. Gopar

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Transporte de electrónico en aislantes topológicos

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Università di Urbino (IT), Dep. De Ciencias Biomoleculares.

Investigador colaborador: prof. Mauro Magnani

Investigador del BIFI que colabora: P. Bruscolini

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: colaboración científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Wisconsin-Medical School. Madison, WI, USA.

Investigador colaborador: John M. Denu

Investigador del BIFI que colabora: José Alberto Carrodegua Villar

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Regulación de la actividad de PEPC-C mediante modificaciones postraduccionales.

Colaboraciones nacionales

Centro de investigación/Departamento/Unidad: IIS Aragón – Universidad de Zaragoza, Departamento de Bioquímica y Biología Molecular y Celular

Investigador colaborador: Julián Pardo
Investigador del BIFI que colabora: Adrián Velázquez Campoy
Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio de interacciones proteína-péptido en proteínas de reconocimiento molecular en inmunología

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Granada, Departamento de Química-Física

Investigador colaborador: Ángel Pey
Investigador del BIFI que colabora: Adrián Velázquez Campoy
Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio de interacciones proteína-ligando y fenómenos de cooperatividad de unión en NQO1, proteína asociada a cáncer

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Recursos Naturales y Agrobiología de Salamanca (IRNASA-CSIC)

Investigador colaborador: Mónica Balsera
Investigador del BIFI que colabora: Adrián Velázquez Campoy
Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio de interacciones proteína-ligando en proteínas implicadas en procesos transferencia de electrones

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad del País Vasco

Investigador colaborador: Prof. Felix Goñi
Investigador del BIFI que colabora: Nunilo Cremades
Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Colaboración dentro del marco del proyecto "Bases moleculares y determinantes estructurales de toxicidad celular de la agregación amiloide en la enfermedad de Parkinson".

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Sevilla, Departamento de Bioquímica Vegetal y Biología Molecular

Investigador colaborador: Irene Días Moreno
Investigador del BIFI que colabora: Adrián Velázquez Campoy
Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio de interacciones proteína-proteína en apoptosis animal y vegetal

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Investigación Biomédica de Bellvitge

Investigador colaborador: Manel Esteller
Investigador del BIFI que colabora: Adrián Velázquez Campoy
Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio de interacciones proteína-DNA en MeCP2, proteína implicada en síndrome de Rett

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of La Rioja/ Química

Investigador colaborador: Francisco Corzana
Investigador del BIFI que colabora: Ramón Hurtado-Guerrero
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Barcelona/Química

Investigador colaborador: Carme Rovira
Investigador del BIFI que colabora: Ramón Hurtado-Guerrero
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Centro Nacional de Microbiología – Instituto de Salud Carlos III (Majadahonda, Madrid)

Investigador colaborador: Adela G. De la Campa
Investigador del BIFI que colabora: José A. Ainsa
Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Desarrollo de inhibidores frente a la topoisomerasa de M. tuberculosis

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Granada

Investigador colaborador: Mercedes Maqueda
Investigador del BIFI que colabora: José A. Ainsa
Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio de actividad antimicrobiana de la bacteriocina AS-48

Centro de investigación/Departamento/Unidad: EEAD-CSIC

Investigador colaborador: Bruno Contreras-Moreira
Investigador del BIFI que colabora: Pilar Catalan, Ernesto Pérez, Antonio Díaz, Ruben Sancho

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Proyectos JGI CSP503006 y Mineco CGL2016-79790-P.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: IAS-CSIC

Investigador colaborador: Pilar Hernández

Investigador del BIFI que colabora: Pilar Catalan, Ernesto Pérez, Antonio Díaz, Ruben Sancho

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Proyectos JGI CSP503006 y Mineco CGL2016-79790-P.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Centro de Investigaciones Biológicas, CSIC, Madrid

Investigador colaborador: Dr. Angel Martínez.

Investigador del BIFI que colabora: Patricia Ferreira

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Investigación conjunta oxidasas dependientes de flavinas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Catálisis y Petroquímica, CSIC, Madrid

Investigador colaborador: Dr. Miguel Alcalde

Investigador del BIFI que colabora: Patricia Ferreira

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Investigación conjunta oxidasas dependientes de flavinas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto Investigaciones Químicas de Sevilla

Investigador colaborador: Dr. Pedro Nieto

Investigador del BIFI que colabora: Patricia Ferreira y Milagros Medina

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Caracterización de la interacción del factor de inducción de apoptosis con su coenzima.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Nanociencia Madrid (IMDEA)

Investigador colaborador: Ricardo Arías-González

Investigador del BIFI que colabora: Fernando Falo

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Estudio de la mecánica de desplegamiento de G-quadruplex.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Investigaciones Biomédicas. CSIC-UAM. Madrid.

Investigador colaborador: Miguel Fernández Moreno y Juan José Arredondo

Investigador del BIFI que colabora: José Alberto Carrodegua Villar

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Knockout de Mth en Drosophila

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Departamento de Producción Animal y Ciencia y Tecnología de los Alimentos. Facultad de Veterinaria. Universidad de Zaragoza.

Investigador colaborador: Rafael Pagán Tomás

Investigador del BIFI que colabora: José Alberto Carrodegua Villar

Tipo de colaboración/Proyecto de investigación: Modificación de cepas bacterianas para reducir los niveles de histamina en productos derivados de la leche.

ANEXO 5. Estancias de investigación

Estancias de investigación, de duración superior a 0-15 días, 15 días a 30 días, >1 mes, realizadas por investigadores del BIFI en centros extranjeros y españoles

Entre 0 y 15 días en centros extranjeros

Nombre del investigador del BIFI: Pilar Catalán
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Federal Scientific Center of the East Asian Terrestrial Biodiversity, Far East Branch of the Russian Academy of Sciences (Rusia)
Investigador principal que lo acoge: Nina Probatova
País: Rusia
Duración: 1 semana
Fechas: 03/08/2017-10/08/2017

Nombre del investigador del BIFI: Milagros Medina
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Department of Chemistry. King's College London
Investigador principal que lo acoge: Dr. Edina Rosta
País: UK
Duración: 5 días
Fechas: 23-29 Marzo 2017

Nombre del investigador del BIFI: Milagros Medina
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Dipartimento di Bioscienze. Università degli Studi di Milano
Investigador principal que lo acoge: Dr. Alessandro Aliverti
País: Italia
Duración: 2 días
Fechas: 26-27 Octubre 2017

Nombre del investigador del BIFI: Jesús Clemente Gallardo
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Dipartimento de Fisica, Università Federico II di Napoli
Investigador principal que lo acoge: Giuseppe Marmo
País: Italia
Duración: 1 semana
Fechas: 20-25 Noviembre 2017

Entre 15 y 30 días en centros extranjeros

Nombre del investigador del BIFI: Pablo Gracia González
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Granada, Facultad de Farmacia, Dpto. de Físicoquímica
Investigador principal que lo acoge: Dr. Angel Orte
País: España
Duración: 23 días
Fechas: 26/06 – 18/07 2017

Nombre del investigador del BIFI: Patricio Fernández Silva
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Mitochondrial Biology Unit-MRC Cambridge
Investigador principal que lo acoge: Massimo Zeviani
País: Reino Unido
Duración: 15 días
Fechas: 1-15 Julio

Nombre del investigador del BIFI: JMG-B
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Istituto Nazionale di Fisica Nucleare
Investigador principal que lo acoge: Fedele Lizzi
País: Italia
Duración: 17 días
Fechas: 11-28 octubre 2017

Nombre del investigador del BIFI: JMG-B

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Zentrum for interdisziplinäre Forschung, Bielefeld, Alemania

Investigador principal que lo acoge: Philippe Blanchard

País: Alemania

Duración: 3 semanas

Fechas: 5-26 noviembre 2017

Nombre del investigador del BIFI: Yamir Moreno

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Network Science Institute, Northeastern University, Boston

Investigador principal que lo acoge: Alessandro Vespignani

País: Estados Unidos

Duración: 3 semanas

Fechas: Junio 2017

Superior a 1 mes en centros extranjeros

Nombre del investigador del BIFI: Víctor A. Gopar

Centro de investigación/Departamento/Unidad: City University of New York

Investigador principal que lo acoge: Azriel Genack

País: USA

Duración: 6Meses

Fechas: 01/09/2016 – 28/02/2017

Nombre del investigador del BIFI: Sergio Arregui

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Centro de Investigación CHU Sainte Justine (Montreal)

Investigador principal que lo acoge: Luis Barreiro

País: Canadá

Duración: 6 semanas

Fechas: 12 Agosto 2017 – 24 Septiembre 2017

Nombre del investigador del BIFI: Alberto Aleta

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Network Science Institute, Northeastern University, Boston

Investigador principal que lo acoge: Alessandro Vespignani

País: Estados Unidos

Duración: 8 semanas

Fechas: 5 Marzo 2017 – 6 Mayo 2017

Estancias de investigación, de duración entre 1 y 15 días, 15 y 30 días, y superior a 1 mes, realizadas por investigadores extranjeros en el IUI

Entre 0 y 15

Nombre del investigador visitante: Alexander Betekhtin

Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: University of Silesia, Department of Plant Anatomy and Cytology (Polonia)

Investigador responsable del BIFI: Pilar Catalan, Ernesto Pérez

Duración: 1 semana

Fechas: 18/06/2017 – 24/06/2017

Nombre del investigador visitante: Natalia Borowska

Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: University of Silesia, Department of Plant Anatomy and Cytology (Polonia)

Investigador responsable del BIFI: Pilar Catalan, Ernesto Pérez

Duración: 1 semana

Fechas: 18/06/2017 – 24/06/2017

Nombre del investigador visitante: Patricia Santos

Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: CMUC, Departamento de Matematica, ISEC Coimbra (Portugal)

Investigador responsable del BIFI: Jesús Clemente Gallardo

Duración: 1 semana

Fechas: Mayo 2017

Superior a 1 mes

Nombre del investigador visitante: Valeria Shiposha
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Tomsk State University (Rusia)
Investigador responsable del BIFI: Pilar Catalan
Duración: 6 meses
Fechas: 09/01/2017 – 08/07/2017

Nombre del investigador visitante: Alexis Hernández
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 22452-970 Rio de Janeiro, Brazil
Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno
Duración: 6 meses
Fechas: 1/1/2017 – 31 /06/2017

Nombre del investigador visitante: Wei Chen
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: School of Electro-Mechanical Engineering, Xidian University, Xi'an 710071, China
Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno
Duración: 12 meses
Fechas: 1/3/2016 – 31 /3/2017

Nombre del investigador visitante: Wang Xiangrong
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Delft University of Technology. The Hague Area, Netherlands
Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno
Duración: 3 meses.
Fechas: 01/9/2017 – 1/12/2017

Nombre del investigador visitante: Clàudia Payrató
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Laboratoire de Physique Théorique et Modélisation, UMR CNRS, Université de Cergy-Pontoise, France.
Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno
Duración: 3 meses.
Fechas: 01/4/2017 – 1/7/2017

Nombre del investigador visitante: Ana Lucia Smith
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: IMT Lucca in the Networks research unit. Italy.
Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno
Duración: 6 meses.
Fechas: 01/03/2017 – 01/09/2017

Nombre del investigador visitante: Kleber Oliveira
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Instituto de Computação - Universidade Estadual de Campinas. Brazil.
Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno
Duración: 3 meses.
Fechas: 20/11/2017 – 17/02/2018

Nombre del investigador visitante: Thomas Peron
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo. Brazil.
Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno
Duración: 1 mes.
Fechas: 3/11/2017 – 1/12/2017

Nombre del investigador visitante: Ana Paola dos Reis Lima
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Department of Applied Mathematics and Statistics (SME) (São Carlos). University of São Paulo. Brazil.
Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno
Duración: 3 1/2 meses
Fechas: 1/12/2016 – 15/03/2017



BIFI, Edificio I+D,
C/ Mariano Esquillor, s/n
50018, Zaragoza (Spain)
Tel. +34 976762988
bifi2017@bifi.es

