

Ponente: Dra. Susana Figueroa Gerstenmaier

Título de la charla: Modelado molecular, una herramienta para comprender y predecir diversos fenómenos

Resumen:

En esta charla mostraremos cómo el modelado molecular puede ayudarnos a entender fenómenos dentro del campo de la Física, la Química y la Biología. Explicaremos en qué consiste esta familia de técnicas y expondremos algunos ejemplos de sus aplicaciones: Como el modelado de un material adsorbente y el cálculo de isothermas de adsorción. Modelado de propiedades termodinámicas de refrigerantes y un ciclo de refrigeración. Cálculo de diagramas de fases L-V de precursores del biodiesel. Solvatación de derivados del fullereno y su aplicación como inhibidores de la agregación del péptido β -amiloide. Dinámica molecular de la proteína Tau y su estructura tridimensional.

Semblanza:

Profesora Titular de Tiempo Completo en el Departamento de Ingenierías Química, Electrónica y Biomédica de la División de Ciencias e Ingenierías, Campus León de la Universidad de Guanajuato. Estudió Ingeniería Química (UNAM, 1990), un máster en Tecnología Química (Biotecnología, IQS, Barcelona, 1993), una maestría en Ciencias Químicas (Fisicoquímica, UNAM, 1997), y doctorado en Ingeniería Química (Universidad Rovira i Virgili, 2002). Realizó estancias en la Universidad Estatal de Carolina del Norte (EE. UU., 2002), en el Instituto de Procesos Químicos Fundamentales de la Academia Checa de Ciencias (Praga, República Checa, 2003), y estancias postdoctorales (UOIT, Oshawa, Canadá, 2004-2006; Universidad de Salerno, Italia 2007-2009). Experiencia en la Industria: Analista de petróleo crudo, Petróleos Mexicanos Internacional, 1991 y 1993-1994. Áreas de Investigación: modelado molecular de procesos de adsorción y caracterización de nanomateriales; cálculo de propiedades termodinámicas, dinámicas, y estructurales de sistemas de interés en Ingeniería Química; Modelado de los procesos bioquímicos involucrados en el Alzheimer; modelado de multi sacáridos y biopolímeros.