

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA



INSTITUTO DE FÍSICA
“Luis Rivera Terrazas”



SEMINARIO
“DR. JESUS REYES CORONA”

“Entropía y Macromoléculas”

Dr. Gerardo Odriozola
Instituto Mexicano del Petróleo, México, DF.

En general, las suspensiones nanoscópicas se caracterizan por contener nanopartículas (macromoléculas, macroiones, cristales, sólidos amorfos, polímeros entrelazados, micelas, gotas, etc.) dispersas en un medio compuesto por entidades de menor dimensión (moléculas de solvente y, si aplica, solutos disueltos). Las fuerzas que experimentan un par de nanopartículas a distancias relativamente pequeñas la una de la otra contemplan no sólo sus interacciones directas, sino también los efectos colectivos del medio. Una forma de abordar dichas interacciones es mediante simulaciones del tipo Monte Carlo, donde se fijan las posiciones relativas del par y se realiza un muestreo sobre las configuraciones que adopta el resto del sistema (todo lo que no sea el par en cuestión). De esta forma, aparecerán fuerzas efectivas sobre las macromoléculas que a modo de estudio se dividen en dos contribuciones, una de origen electroestático (cuando existe la presencia de cargas) y otra de contacto, también llamada de vaciado o entrópica. Las componentes son, sin embargo, interdependientes. Realizando un estudio sistemático donde se varíe la distancia y orientación entre las macromoléculas es posible obtener un mapa de energías efectivas de interacción. A modo de ejemplo, en esta presentación se muestran los resultados que se obtienen al aplicar esta metodología a un par de sistemas: El complejo ADN-membranas fosfolípicas; y un modelo de enzima-sustrato. De los resultados se infiere la importancia relativa de la fuerza de contacto (contribución entrópica) al ser comparada con la componente electroestática (de carácter entálpico). Asimismo, los resultados presentan un acuerdo cualitativo con el comportamiento de los sistemas reales.

Auditorio-IFUAP
Viernes 14 de Noviembre de 2014
13:00 Hrs.