

PROF. AGREGADO JOSÉ GREGORIO PARRA FIGUEREDO

Universidad de Carabobo
Facultad de Ciencias y Tecnología
Departamento de Química
Unidad de Fisicoquímica
Bárbula-Carabobo, Venezuela

Teléfono: (412) 843-7640
E-mail: jgparra2@uc.edu.ve

Educación

* Candidato a Doctor en Ciencias en la Universidad Central de Venezuela. Facultad de Ciencias. Postgrado en Química. Actualmente, fecha de graduación: Septiembre 2015.

* Licenciado en Química. Universidad de Carabobo. Diciembre, 2002.

Premios y Reconocimientos

* Investigador tipo A-1. Programa de estímulo a la innovación e investigación (PEII). Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación. Marzo, 2013.

* III Encuentro de Ciencia y Tecnología en el asesoramiento de la actividad: Experiencias en Procesos Químicos. Instituto Universitario de Tecnología y Administración. Valencia, 2004.

* 1er. Lugar en las I Jornadas de iniciación a la investigación de estudiantes de la FACYT-Universidad de Carabobo. Noviembre, 2002.

* 1er. Simposio de Química. " La Educación en Química hacia un enfoque técnico. Bárbula, Enero 2015.

Experiencia Profesional

* Profesor Agregado a Dedicación Exclusiva en el área de Fisicoquímica y Química General. Universidad de Carabobo. Facyt. Departamento de Química. Desde 04/04/2012, actualmente.

* Coordinador de la Unidad Académica de Fisicoquímica. Facyt. Departamento de Química. Desde Octubre, 2012-Actualmente.

* Miembro fundador del Lab. De Química Computacional (QUIMICOMP). Facyt. Departamento de Química. 2011.

* Profesor Asistente a Dedicación Exclusiva en el área de Fisicoquímica y Química General. Universidad de Carabobo. Facyt. Departamento de Química. Desde 17/10/2007 hasta 04/04/2012.

* Profesor Instructor a Dedicación Exclusiva en el área de Fisicoquímica y Química General. Universidad de Carabobo. Facyt. Departamento de Química. Desde 03/08/2004 hasta 17/10/2007.

* Proyecto FONACYT G-2005000424. Modelaje nanométrico y mesoscópico de las interacciones involucradas en el sistema roca-crudo-fase acuosa como herramienta para asistir la recuperación y transporte de los crudos pesados. Participante, 2005-2008.

* Profesor Contratado a Tiempo Completo en el área de Química Analítica y Química General. Universidad de Carabobo. Facultad Experimental de Ciencias y Tecnología. Departamento de Química. Desde 13/10/2003 hasta 13/10/2004.

* Docente Contratado en Tecnología del Petróleo y Química General. Instituto de Administración y Tecnología Industrial. Desde 21/04/2002 hasta 22/05/2004.

* Preparador de Lab. De Fisicoquímica. Universidad de Carabobo. Facultad Experimental de Ciencias y Tecnología. Departamento de Química. Desde 31/07/2001 hasta 18/12/2002.

* Preparador de Química General y Lab. De Química General y Analítica. Universidad de Carabobo. Facultad Experimental de Ciencias y Tecnología. Departamento de Química. Desde 14/07/2000 hasta 31/07/2001.

Habilidades y Destrezas

* Cálculos ab-initio usando los programas GAMESS-US, NWChem 6.0 y ORCA.

* Cálculos de dinámica molecular usando los programas GROMACS, DL-POLY y Materials Studio 4.0.

* Cálculos de dinámica molecular tipo coarse grained y DPD usando GROMACS y DL-MESO.

* Visualización de estructuras moleculares usando Avogadro, wxMacMolPlt, VMD y Pymol.

* Manejo de herramientas de oficina como LibreOffice, Word, Excel, LaTeX, LyX.

* Manejo avanzado de sistemas operativos Linux versiones Ubuntu y CentOS.

Manejo avanzado en equipos de medición de propiedades interfaciales y reológicas.

Publicaciones

Internacionales

* Yosslen Aray, Raiza Hernández-Bravo, José G. Parra, Jesús Rodríguez y David S. Coll. Exploring the structure-solubility relationship of asphaltene models in toluene, heptane, and amphiphiles using a molecular dynamic atomistic methodology. *Journal of Physical Chemistry A*, 115, 2011, 11495-11507.

* Exploring the Effect of the O-(1-heptylnonyl) Benzene Sulfonate Surfactant on the Nature of the Lineal Hydrocarbons/Water Interface by Means of an Atomistic Molecular Dynamic Simulation. Aray,

Yosslen; Parra, José G.; Jimenez, Doris; Rodriguez, Jesús; Henriquez, Francisco; Cornejo Mauricio y Ludeña, Eduardo. En preparación, revista PCCP.

Nacionales

* Molecular Dynamics Simulations of 1-butanol and 2-butanol located at the n-hexane/water, cyclohexane/water and toluene/water interfaces. Parra, José G; Aray, Yosslen. *Avances en Química*, 9(3), año 2014, páginas 87-96.

* José G. Parra, Yosslen R. Aray. Predicción del Volumen Molar y la Entalpía Molar de Vaporización de moléculas orgánicas usando variables determinadas mediante el modelo de apantallamiento tipo conductor. *Revista Científica Avances en Química*, 6(3), año 2011, páginas 79-88.

* José G. Parra, Yosslen R. Aray. Estimación del Parámetro de Solubilidad de modelos de fracciones A1 y A2 de Asfaltenos mediante dinámica molecular. *Revista Faraute Ciencias y Tecnología*. 5(1), 2010, 68-76.

* José G. Parra. Estudio mesoscópico de soluciones de polióxido de etileno (PEO) en agua usando dinámica disipativa de partículas. Trabajo de Ascenso a profesor Asistente. Universidad de Carabobo. Biblioteca central de la UC. Octubre, 2008.

* José G. Parra, Genny Galvis. Evaluación de la energía de adsorción de fracciones de asfaltenos sobre superficies de rocas carbonatadas mediante dinámica molecular. I Memorias del VI Congreso de Investigación de la Universidad de Carabobo. Octubre, 2008.

* José G. Parra, Yosslen R. Aray. Relación entre la densidad de energía cohesiva de hidrocarburos, alcoholes lineales y compuestos aromáticos con la densidad de energía libre no enlazante estimada por métodos de solvatación. Memorias VII Congreso Nacional y 1er Congreso Internacional de Investigación de la Universidad de Carabobo. Trabajo aceptado, TOMO II, 2010, 1623-1628.

* José G. Parra, Yosslen R. Simulación por dinámica molecular del surfactante dodecil sulfato de sodio ubicado en la interface vacío-agua. Memorias del VIII Congreso Nacional y 2do. Congreso Internacional de Investigación de la Universidad de Carabobo. Noviembre, 2013 (en prensa).

Congresos y Eventos Científicos

* V Congreso de Físicoquímica Teórica y Computacional. Ponente Cartel. Altos de Pipe-Venezuela. Diciembre, 2014.

* III Congreso Venezolano de Ciencia, Tecnología e Innovación en el marco de la LOCTI y PEII. Ponente Cartel. Ciencias básicas. Caracas-Venezuela. Noviembre, 2013.

* 9th Workshop of computational chemistry and molecular spectroscopy (WCCMS). Ponente cartel. Punta de Tralca-Chile, Octubre 2014.

* Instructor invitado en la 2da. Escuela de Química Teórica y Computacional de las Américas-PREFALC 2014. Universidad San Francisco de Quito-Ecuador, Julio 2014.

- * II Congreso Venezolano de Ciencia, Tecnología e Innovación en el marco de la LOCTI y PEII. Ponente Cartel. Ciencias básicas. Caracas-Venezuela. Noviembre, 2013.
- * VIII Congreso Nacional y 2do. Congreso Internacional de Investigación de la Universidad de Carabobo. Coordinador de la sesión: Ciencias Básicas. Valencia-Venezuela. Noviembre, 2013.
- * VIII Congreso Nacional y 2do. Congreso Internacional de Investigación de la Universidad de Carabobo. Ponente Oral. Valencia-Venezuela. Noviembre, 2013.
- * IV Congreso de Físicoquímica Teórica y Computacional. Ponente Cartel. Caracas-Venezuela. Noviembre, 2012.
- * VII Congreso Nacional y 1er. Congreso Internacional de Investigación de la Universidad de Carabobo. Ponente Oral. Valencia-Venezuela. Diciembre, 2010.
- * IX Congreso Venezolano de Química y I Congreso Internacional. Coordinador de la sesión: Química Teórica I. Cumaná-Venezuela. Junio, 2009.
- * IX Congreso Venezolano de Química y I Congreso Internacional. Ponente Oral. Cumaná- Venezuela. Junio, 2009.
- * VI Congreso de Investigación de la Universidad de Carabobo. Ponente Oral. Valencia- Venezuela. Octubre, 2008.
- * VII Congreso Venezolano de Química. Ponente Oral. Mérida-Venezuela. Noviembre, 2005.
- * IV Congreso de Investigación y I Congreso de Postgrado de la Universidad de Carabobo. Asistente. Valencia-Venezuela. Noviembre, 2002.
- * I Jornada de Iniciación a la Investigación de Estudiantes FACYT de la Universidad de Carabobo. Ponente Oral. Valencia-Venezuela. Octubre, 2002.

Conferencias dictadas

-
- * Métodos de solvatación continua y dinámica molecular aplicados para predecir la solubilidad de compuestos orgánicos. V Congreso de fisicoquímica teórica y computacional. IVIC, Altos de Pipe-Venezuela. Diciembre, 2014.
 - * Dinámica molecular y métodos de solvatación continuos aplicados a sistemas complejos. Escuela Superior Politécnica del Litoral (ESPOL), Facultad de Ciencias Naturales, Guayaquil-Ecuador. Octubre, 2014.

Cursos dictados

- * Química General. Universidad de Carabobo. Facultad de Ciencias y Tecnología. Departamento de Química.Pre-grado.
- * Fisicoquímica I. Termodinámica y termoquímica. Facultad de Ciencias y Tecnología. Departamento de Química.Pre-grado.
- * Fisicoquímica II. Equilibrio en solución y Equilibrio químico. Facultad de Ciencias y Tecnología. Departamento de Química.Pre-grado.
- * Fisicoquímica III. Cinética Química, Electroquímica y Teoría Cinético Molecular de Gases. Facultad de Ciencias y Tecnología. Departamento de Química.Pre-grado.
- * Introducción a la simulación molecular de sistemas complejos usando dinámica molecular.Facultad de Ciencias y Tecnología. Departamento de Química.Pre-grado.
- * Fundamentos y aplicaciones de Dinámica Molecular y Entrenamiento y uso del Programa GRONigen MACHines Simulations (GROMACS). Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas de la ESPOL. Guayaquil-Ecuador, 2014.

Proyectos de Investigación

- * Modelaje a nivel nanométrico y mesoscópico de las interacciones involucradas en el sistema Roca-Petróleo-Fase Acuosa como herramienta para asitir la recuperación y transporte de los crudos pesados. Participante. Proyecto del FONACYT. G-2005000424. Universidad de Carabobo. Facultad de Ciencias y Tecnología. Departamento de Química.
- * Diseño de una metodología usando Fragmento Polarizable Efectivo (EFP) para correlacionar la solubilidad de compuestos poliaromáticos con la energía de solvatación. Proyecto de investigación en desarrollo en el laboratorio de química computacional del departamento de química bajo mi supervisión. Actualmente.
- * Explorando las interacciones moleculares de surfactantes y alcoholes lineales ubicados en la región interfacial hidrocarburo/agua usando Dinámica Molecular para explicar la formación de Microemulsiones. Proyecto de investigación en desarrollo en el laboratorio de química computacional del departamento de química bajo mi supervisión. Actualmente.
- * Construcción de un Software para realizar la parametrización de Force Field usados en el programa GROMACS. Proyecto de investigación en desarrollo en el laboratorio de química computacional del departamento de química bajo mi supervisión. Actualmente.