

I Encontro dos Químicos da Universidade Federal de São João del-Rei



Visita Técnica da Rede Mineira

29 de Fevereiro de 2012



Nome: Moacyr Comar Jr

Campus/Depto: CCO – Bioquímica

Endereço Currículo Lattes:

Site:

<http://ufsjmodelagemmolecular.blogspot.com/> (em construção)

E-mail: mcomjr@gmail.com



Área/Linha de Pesquisa

A área de concentração é a Físico-Química. Dentre as linhas de pesquisa estão a Dinâmica Molecular de sistemas de interesse bioquímico e biotecnológico e cálculos *ab initio* de nanotubos de carbono

Projetos em Andamento

Atualmente existem projetos em andamento na área de interação de NTC com Li; interação de toxina com canal de sódio.

Publicações relevantes

COMAR JUNIOR, M. *et al*, Journal of Molecular Structure. Theochem, v. 808, p. 25-33, 2007
COMAR JUNIOR, M. *et al* European Journal of Medicinal Chemistry, v. 44, p. 312-321, 2009
COMAR JUNIOR, M. *et al* STRUCTURAL CHEMISTRY, in press.

Colaborações/Parcerias

Albérico Borges F. da Silva – USP
Cesar Tisch – UEL

Orientações

Doutorado – 01
Mestrado – 02
IC - 03

Infra-estrutura

O LMM conta com uma infraestrutura de 14 computadores para realização de cálculos e 09 computadores para a realização de aulas de modelagem molecular (disciplina da graduação em Bioquímica e na pós em Ciências da Saúde)

Palavras-Chave

Dinâmica Molecular; NTC; toxinas