

DIP 024 - Interações não-covalentes

Professor: Ignez Caracelli

05 créditos – mestrado/doutorado

Optativa

Ementa:

1. Interações covalentes e não-covalentes
2. Programas de visualização gráfica de moléculas e biomoléculas;
3. Interações não-covalentes e sua importância no estudo de estruturas supramoleculares;
4. Ligações de Hidrogênio
5. Interações de van der Waals
6. Interações π
7. Efeitos hidrofóbicos
8. Formação de Complexos Moleculares e Aplicações;
9. Métodos *in silico*: docking molecular.

Bibliografia Principal:

1. Caracelli, I. & Zukerman-Schpector, J. Introdução à Biofísica Estrutural - ISBN: 978-85-7600-065-5 - 2a.reimpressão . 2a. ed. EdUFSCar, 2010. v. 1. 71 p.
2. Ermondi, G.; Caron, G. *Biochemical Pharmacology*, 72, 1633-1645, 2006.
3. Contreras-García, J., Johnson, E. R., Keinan, S., Chaudret, R., Piquemal, J. P., Beratan, D. N., & Yang, W. *Journal of chemical theory and computation*, 7, 625-632, 2011.
4. Voet, D. Voet, J. G. **Bioquímica**. 4. ed. Porto Alegre, RS: Artmed, 2013. 1481 p. ISBN 978-85-8271-004-3.
5. Métodos de Química teórica e modelagem molecular. São Paulo: Ed. Livraria da Física, 2007. 539 p. ISBN 978-85-88325-87-6.
6. Artigos selecionados para seminários.
7. Internet:

<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

<https://www.ebi.ac.uk/thornton-srv/databases/cgi-bin/pdbsum/GetPage.pl?pdbcode=index.html>

<http://ndbserver.rutgers.edu/>

<http://www.ccdc.cam.ac.uk/>

<http://www.ignez.com>

Bases de dados de estruturas cristalinas via CAPES

Consulta a bancos de dados de estruturas tridimensional de moléculas.

Artigos científicos indicados pelo professor e disponíveis na internet.