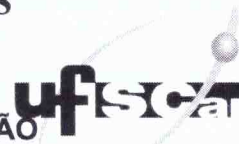




UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA
FICHA DE CRIAÇÃO DE DISCIPLINA DE CURTA DURAÇÃO



Início da Validade	Ano	S
	2021	1º

Nome da Disciplina **Medidas de Quiralidade**

Especifica da Área de Concentração em: - *Química*

Código da Disciplina	PPG	Número
	200	11

Total de Créditos	5
-------------------	---

Principais Docentes Responsáveis

- 1- Prof. Dr. André Farias de Moura
- 2- Dr. Asdrubal Lozada Blanco

Carga Horária da Disciplina

Aulas Teóricas	24
----------------	----

Aulas Práticas	
----------------	--

Exercícios Seminários	51
-----------------------	----

Será ministrada em língua: Português Número de vagas: _____

Período: 01/06/2021 - 20/07/2021

Horário: terça-feira 19h00-21h00 e sexta-feira 19h00-21h00 Auditório: sala da plataforma Google Meet

Qual será o método de avaliação utilizado na disciplina?

Os alunos inscritos no curso desenvolverão atividades práticas de simulação computacional em química, utilizando softwares e/ou escrevendo seus próprios algoritmos, apresentando um relatório para cada tópico quinzenal, contendo:

1. Descrição teórica do caso de estudo.
2. Metodologia para resolução do problema proposto.
3. Resultados e Discussão.

(Anexar cópia do passaporte do convidado)

Ementa da Disciplina

- | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. Aspectos fundamentais da quiralidade.
1.1 Definições históricas e modernas da quiralidade. |
| 2. Medidas de quiralidade em química e física.
2.1 Funções da quiralidade.
2.2 Índices de quiralidade baseados na raiz média quadrática (RMS).
2.3 Medidas baseadas na distância de Hausdorff. |
| 3. Aproximações gerais à quiralidade.
3.1 Quiralidade molecular.
3.2 Quiralidade e deformações aquirais.
3.3 Quiralidade e superfícies moleculares. |
| 4. Dicroísmo circular vibracional.
4.1 Cálculos no domínio do tempo: Métodos de simulação. |
| 5. Dicroísmo circular eletrônico.
5.1 Aproximação mecânico-quântica: Métodos de simulação. |

Bibliografia Principal

(autor, Título, ano da Publicação e Editora)

- 1- Mezey, P.G. New Developments in molecular Chirality. Springer-Science+Business Media, B.V, 1991
- 2- Flapan, E. When Topology Meets Chemistry: A Topological Look at Molecular Chirality. Cambridge University Press, 2000.
- 3- Petitjean, M. Chirality and Symmetry Measures: A Transdisciplinary Review. Entropy, 2003, 5, 271.
- 4- Nagao, K. and Atsuya, M. Circular Dichroism and Magnetic Circular Dichroism Spectroscopy for Organic Chemists. RSC Publishing, 2012.
- 5- Grunenberg, J. Computational Spectroscopy: Methods, Experiments and Applications. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co KgaA, 2010.

Disciplinas Pré-requisitos, se houver

Código	Nome
1- _____	_____
2- _____	_____

Parecer sobre a proposta

_____/_____/_____

| Assinatura do Parecerista

Aprovação da Coordenação do Programa de Pós-Graduação

Esta Ficha de Caracterização foi Aprovada na ____.^a Reunião da Comissão deste Programa de Pós-graduação, realizada em __ / __ / ____.

__ / __ / ____

Assinatura do Coordenador do Programa