



### I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA	Nº de Horas-Aula Semanais	Total de Horas/Aula Semestrais
QMC 3207	Química Orgânica Avançada I	4	60

### II. PROFESSOR MINISTRANTE

Prof. Bruno S. Souza

### III. EMENTA

Efeitos Estruturais. Princípio de Estereoquímica. Efeitos esteroeletônicos. Reações de Substituição Nucleofílica Alifática. Reações de Eliminação e Adição. Reações do Grupo Carbonila. Substituição Aromática.

### IV. OBJETIVOS

Objetivo Geral: aluno deverá ser capaz de, no final do curso, aplicar os fundamentos teóricos na dedução das propriedades e reatividade dos compostos, discutindo reações e mecanismos básicos em química orgânica.

Objetivos Específicos: Na medida em que o aluno receba os conteúdos programáticos, resolva os exercícios e execute as tarefas de leitura e de estudos, deverá ser capaz de:

1. Aplicar os fundamentos teóricos e a teoria estrutural ao estudo das reações e dos mecanismos;
2. Reconhecer as propriedades dos compostos;
3. Relacionar as propriedades dos compostos às reações características;
4. Aplicar os conhecimentos teóricos básicos na análise e discussão dos mecanismos (gerais) das reações;
5. Criticar artigos científicos da literatura corrente relacionados com o conteúdo programático da disciplina.

### V. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

#### 1. Fundamentos de Química Orgânica:

**1.1** Teoria de orbitais moleculares: orbitais híbridos, ligações pi deslocadas, aromaticidade, método da combinação linear de orbitais atômicos, orbitais de fronteira (HOMO-LUMO).

**1.2** Efeitos Esteroeletônicos: Interação entre orbitais; efeito anomérico; influência na conformação de compostos orgânicos.

**1.3** Ácidos e Bases: Teoria de Bronsted; ácidos e bases de Lewis, ácidos e bases duros e moles, efeitos da estrutura e do meio sobre a força de ácidos e bases; escalas de acidez.

**1.4** Estudo e Descrição de Mecanismos de Reações Orgânicas: parâmetros termodinâmicos e cinéticos para as reações. Aproximação do estado estacionário, teoria do estado de transição, princípio da reversibilidade microscópica, velocidade de reação vs. temperatura, efeitos do substituinte e relações lineares de energia livre, controle cinético vs. termodinâmico, postulado de Hammond, princípio de Curtin-Hammett, efeito isotópico, identificação de produtos e intermediários, catálise por ácido ou base.

**1.5** Princípios de Estereoquímica: descritores estereoquímicos, topicidade, separação e identificação de estereoisômeros. Estereoseletividade e estereoespecificidade.

**2. Reações de substituição nucleofílica alifática:** evidências mecanísticas; mecanismo via par iônico; carbocátions (clássico e não clássico); estereoquímica da substituição nucleofílica; reatividade: efeitos da estrutura do substrato, do nucleófilo, do grupo de saída, do meio reacional (solvente).

**3. Reações de eliminação:** evidências mecanísticas; estereoquímica da eliminação; orientação da eliminação; reatividade: efeitos da estrutura do substrato, da base/nucleófilo, do grupo de saída, do meio reacional.

**4. Reações de adição:** eletrofílica, nucleofílica e via radical livre; evidências mecanísticas;



orientação; estereoquímica; reatividade: efeitos da estrutura do substrato, dos grupos atacantes e de saída, do meio reacional.

**5. Reações dos compostos carbonílicos:** Padrões mecanísticos das reações de adição e substituição à centros carbonílicos.

**6. Substituição Aromática:** substituição eletrofílica; substituição nucleofílica via adição eliminação e via eliminação-adição. Efeitos de substituinte.

#### **VI. METODOLOGIA DE ENSINO / DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA**

Aulas teóricas com utilização de quadro negro/giz, retro-projetor e multimídia. Aulas de exercícios em grupo.

#### **VII. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO**

As avaliações serão feitas através de provas escritas e seminários referentes ao conteúdo programático. A média final será calculada pela média das notas das provas e seminários.

#### **VIII. BIBLIOGRAFIA BÁSICA**

1. CAREY, F.A.; SUNDBERG, R. J. Advanced organic chemistry. 3rd ed. New York: Plenum Press, 1993. v. 1: Structure and mechanisms.
2. LOWRY, T. H.; RICHARDSON, K. S. Mechanism and Theory in Organic Chemistry. 3rd ed. New York: Harper and Row, 1987.
3. MARCH, J. Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure. 4th ed. New York: John Wiley, 1992.
4. ANSLYN, E. V.; DOUGHERTY, D. A. Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books, 2006.
5. MASKILL, H. Mechanisms of Organic Reactions. New York: Oxford University Press, 2000.
6. MASKILL, H. Structure and Reactivity in Organic Chemistry. New York: Oxford University Press, 2000.
7. KIRBY, A. J. Stereoelectronic Effects. New York: Oxford University Press, 2000.