

unioeste

Universidade Estadual do Oeste do Paraná

Campus de Toledo

Rua da Faculdade, 645 - Jd. Santa Maria - Fone: (45) 3379-7060 - CEP 85903-000 - Toledo - PR

Email: toledo.mestradoquimica@unioeste.br



1

Anexo II – Resolução nº 133/2003-CEPE

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DO OESTE DO PARANÁ
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO**

PLANO DE ENSINO - PERÍODO LETIVO/ANO - 1º/2023

Programa: Programa de Pós-Graduação em Química - PPGQUI

Área de Concentração: Química

Mestrado em Química

Centro das Engenharias e Ciências Exatas - CECE

Campus de Toledo

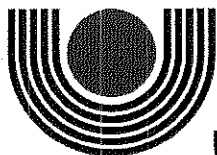
DISCIPLINA

Código	Nome	Carga horária		
		AT ¹	AP ²	Total
	Química Orgânica Avançada	60		60

⁽¹⁾ Aula Teórica; ⁽²⁾ Aula Prática)

Ementa

Métodos de determinação dos mecanismos de reações. Aspectos termodinâmicos e cinéticos. Reatividade e estrutura. Substituição nucleofílica alifática: S_N2 e S_N1, par iônico e participação do grupo vizinho. Reações de eliminação: E1, E2 e E1cB. Reatividade e efeitos de orientação. Estereoquímica. Reações de adições polares: alcenos e alcinos. Carbânions e outras espécies nucleofílicas de carbono. Aromaticidade: mecanismos das reações de substituição eletrofílica e nucleofílica aromática, orientação e reatividade. Reações de compostos carbonílicos.



unioeste

Universidade Estadual do Oeste do Paraná

Campus de Toledo

Rua da Faculdade, 645 - Jd. Santa Maria - Fone: (45) 3379-7060 - CEP 85903-000 - Toledo - PR

Email: toledo.mestradoquimica@unioeste.br



PARANÁ
GOVERNO DO ESTADO

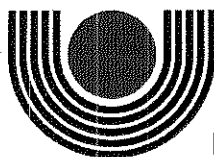
2

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.



unioeste

Universidade Estadual do Oeste do Paraná

Campus de Toledo

Rua da Faculdade, 645 - Jd. Santa Maria - Fone: (45) 3379-7060 - CEP 85903-000 - Toledo - PR

Email: toledo.mestradoquimica@unioeste.br



Conteúdo Programático

1. Fundamentos de Química Orgânica:

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

1.2 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.

1.3 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 Stereoquímica: relações enantioméricas e diastereoméricas, relações pró-quirais; resolução enantiomérica.

2. Reações dos compostos carbonílicos:

2.1 Padrões mecanísticos das reações de adição e substituição à centros carbonílicos.

3. Substituição Nucleofílica:

3.1 Substituição nucleofílica pelo mecanismo de ionização (S_N1)

3.2 Substituição nucleofílica pelo mecanismo de deslocamento direto (S_N2)

3.3 Relação entre estereoquímica e os mecanismos de substituição

3.4 Efeitos de solvatação e estrutura na reatividade

3.4.1 Características de nucleofilicidade, efeitos de solvatação na nucleofilicidade, efeitos do grupo de saída, efeitos da conjugação na reatividade

3.5 Participação do grupo vizinho

3.6 Estrutura e reações de intermediários carbocátions

3.7 Reação de Mitsunobu

4. Reações de Eliminação.

4.1 Mecanismos de E1, E2 e E1cb

4.2 Regioquímica das eliminações

4.3 Stereoquímica das reações E2

4.4 Desidratação de álcoois

5. Adições eletrofílicas à ligação múltipla C-C

5.1 Adições eletrofílicas à alcenos: adição de HX, adição de halogênios, hidratação, sulfenilação e selenilação, hidroboração.

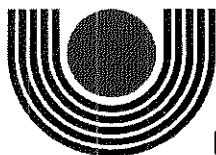
5.2 Ciclização eletrofílica: halociclização, ciclização com espécies eletrofílicas de enxofre e selênio, Regras de Baldwin.

6. Reações de Substituição Aromática

6.1 Critérios de aromaticidade

6.2 Reações de Substituição eletrofílica aromática: nitração, halogenação, alquilação e acilação de Friedel-Crafts, Metalçãoeletrofílica

6.3 Relação estrutura x reatividade de benzenos substituídos



unioeste

Universidade Estadual do Oeste do Paraná

Campus de Toledo

Rua da Faculdade, 645 - Jd. Santa Maria - Fone: (45) 3379-7060 - CEP 85903-000 - Toledo - PR

Email: toledo.mestradoquimica@unioeste.br



6.4 Reações de substituição nucleofílica aromática: íons arildiazônio como intermediários sintéticos, substituição pelo mecanismo de adição-eliminação, substituição pelo mecanismo de eliminação-adição.

6.5 Reações de substituição aromática catalisadas por metais de transição: reações catalisadas por cobre, reações catalisadas por Paládio.

Atividades Práticas – grupos de alunos

Metodologia

Considerando a Ordem de Serviço nº 005/2022-GRE que dispõe sobre o retorno das aulas presenciais nos cursos de pós-graduação *latu sensu* e *strict sensu* da Unioeste, a metodologia adotada será baseada em aulas teóricas expositivas, utilizando recursos audiovisuais existentes na instituição, tais como projetor multimídia, quadro-negro, giz e apagador. Serão propostos estudos de caso utilizando-se artigos relevantes da área.

Avaliação

(critérios, mecanismos, instrumentos e periodicidade)

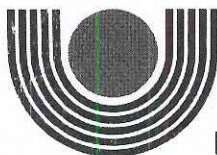
A avaliação consistirá da média de três provas abrangendo os conteúdos abordados, com peso (6) e um seminário em formato de aula com peso (4).

A média final será calculada pela seguinte expressão:

$$MF = M(P)*0,6 + M(S)*0,4$$

Bibliografia básica

1. CAREY, F., "Organic Chemistry", 5ª edição, McGrawHill. New York, EEUU, 1997.
2. MARCH, J. Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure. 6th ed. New York: John Wiley, 2007.
3. ANSLYN, E. V.; DOUGHERTY, D. A. Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books, 2006.



unioeste

Universidade Estadual do Oeste do Paraná

Campus de Toledo

Rua da Faculdade, 645 - Jd. Santa Maria - Fone: (45) 3379-7060 - CEP 85903-000 - Toledo - PR

Email: toledo.mestradoquimica@unioeste.br



5

Bibliografia complementar

1. **LOWRY, T. H.; RICHARDSON, K. S.** Mechanism and Theory in Organic Chemistry. 3rd ed. New York: Harper and Row, 1987.
2. **MASKILL, H.** Mechanisms of Organic Reactions. New York: Oxford University Press, 2000.
3. **MASKILL, H.** Structure and Reactivity in Organic Chemistry. New York: Oxford University Press, 2000.
4. **KIRBY, A. J.** Stereoelectronic Effects. New York: Oxford University Press, 2000.

Docentes

Flávia Giovana Manarin – 20 horas

Isaq George Rosset – 20 horas

Renato Eising – 20 horas

Data: 08/05/2023

Assinatura do docente responsável pela disciplina

Colegiado do Programa (aprovação)

Ata nº 03, de 12/05 /2023.

Coordenador: Cleber Antonio Lindino

Assinatura
Prof. Dr. Cleber Antonio Lindino
Coordenador do Programa de
Pós-Graduação em Química
Portaria N° 0436/2023-GRE

Conselho de Centro (homologação)

Ata de nº 04, de 24/05 /2023.

Diretor de Centro: Elvio Antonio de Campos

Assinatura

Elvio Antônio de Campos
Diretor do Centro de Engenharias
e Ciências Exatas
Portaria nº 0027/2020-GRE
Toledo - Campus de Toledo

Encaminhada cópia à Secretaria Acadêmica em: / / .

Nome/assinatura