

PLANO DE ENSINO

Campus funcionamento: Toledo

Centro responsável: Centro de Engenharias e Ciências Exatas

Programa: Química

Carga horária: 60

Turno:

Creditos: 4

Nível:

Mestrado

Data de Fechamento do PE: 20/03/2024 **Prd. Letivo:** 2024/1

Aprovação: 21/03/2024 **Ata nº 02/2024-PPGQUI**

Homologação (Conselho de Centro): 09/04/2024 **Ata nº 02/2024-CECE**

Disciplina

Química orgânica avançada

Ementa

Resolução: 065/2016-CEPE

Métodos de determinação dos mecanismos de reações. Aspectos termodinâmicos e cinéticos. Reatividade e estrutura. Substituição nucleofílica alifática: SN2 e SN1, 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. Reações de cicloadição: reações de Diels-Alder, reações de cicloadição 1,3-dipolar. Reações radiculares.

Objetivo geral

Objetivos Específicos

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.

Atividades Práticas

Avaliação

A avaliação consistirá da média de quatro atividades (listas de exercícios) abrangendo os conteúdos abordados, com peso (10).

Logo, a média final será calculada pela seguinte expressão:

$$MF = (A1+A2+A3+A4)/4$$

Docentes

Nome	C/H
Flávia Giovana Manarin	15

PLANO DE ENSINO

Docentes

Nome	C/H
Isac George Rosset	15

Docentes

Nome	C/H
Renato Eising	15

Docentes

Nome	C/H
Mauricio Ferreira da Rosa	15

Conteúdo Programático

Título	C/H
--------	-----

1. Fundamentos de Química Orgânica

Teoria de orbitais moleculares: orbitais híbridos, ligações pideslocalizadas, aromaticidade, método da combinação linear de orbitais atômicos, orbitais de fronteira (HOMO-LUMO).
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.
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.
Estereoquímica: relações enantioméricas e diastereoméricas, relações pró-quirais; resolução enantiomérica.

2. Substituição Nucleofílica

Substituição nucleofílica pelo mecanismo de ionização (SN1)
Substituição nucleofílica pelo mecanismo de deslocamento direto (SN2)
Relação entre estereoquímica e os mecanismos de substituição
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
Participação do grupo vizinho
Estrutura e reações de intermediários carbocátions
Reação de Mitsunobu

3. Reações de Eliminação

Mecanismos de E1, E2 e E1cb
Regioquímica das eliminações
Estereoquímica das reações E2
Desidratação de álcoois

4. Adições eletrofílicas à ligação múltipla C-C

Adições eletrofílicas à alcenos: adição de HX, adição de halogênios, hidratação, sulfenilação e selenilação, hidroboração.
Ciclização eletrofílica: halociclização, ciclização com espécies eletrofílicas de enxofre e selênio, Regras de Baldwin.

5. Reações de Substituição Aromática

Crítérios de aromaticidade
Reações de Substituição eletrofílica aromática: nitração, halogenação, alquilação e acilação de Friedel-Crafts, Metalação eletrofílica
Relação estrutura x reatividade de benzenos substituídos
Reações de substituição nucleofílica aromática: íons arildiazônio como intermediários sintéticos, substituição

PLANO DE ENSINO

Conteúdo Programático

Título

C/H

pelo mecanismo de adição-eliminação, substituição pelo mecanismo de eliminação-adição.
Reações de substituição aromática catalisadas por metais de transição: reações catalisadas por cobre, reações catalisadas por Paládio.

7. Reações dos compostos carbonílicos

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

8. Reações Pericíclicas

Reações eletrocíclicas

Reações sigmatrópicas

Reações de cicloadição

9. Fundamentos de fotoquímica

Fotoquímica de alcenos

Reação di-pi-metano

Reação de compostos carbonílicos

Fotosubstituição

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.

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.