



DADOS DE IDENTIFICAÇÃO E ATRIBUTOS

CARGA HORÁRIA (estudante)							MODALIDADE/ SUBMODALIDADE	PRÉ-REQUISITO (POR CURSO)					
T	T/P	P	PP	Ext	E	TOTAL	Disciplina / Teórico						
60						60							
CARGA HORÁRIA (docente/turma)							MÓDULO						SEMESTRE DE INÍCIO DA VIGÊNCIA
T	T/P	P	PP	Ext	E	TOTAL	T	T/ P	P	PP	Ext	E	2023.2
60						60	20						

EMENTA

Estrutura e reatividade de compostos orgânicos. Métodos de estudos dos mecanismos. Intermediários reativos: carbocations, carbenos, carbanions, radicais livres, etc. Principais tipos de reações heterolíticas, homolíticas e pericíclicas.

OBJETIVOS

OBJETIVO GERAL

Habilitar o aluno a avaliar criticamente e interpretar os mecanismos das reações orgânicas iônicas, radicalares e pericíclicas.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Familiarizar os estudantes com a teoria do orbital molecular de fronteira;
- Capacitar o estudante a compreender a etapa determinante dos mecanismos das reações radicalres, pericíclicas e iônicas da química orgânica.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

- Natureza de reagentes e produtos
  - Tipos de reações orgânicas
  - Importância da detecção de todos os produtos
  - Constante de velocidade e energia de ativação
  - Ordem de reação e composição do estado de transição
  - Controle cinético e termodinâmico da composição dos produtos
- A teoria dos orbitais moleculares aplicadas às reações orgânicas
  - A teoria dos orbitais moleculares de fronteira
    - Topologia dos orbitais moleculares HOMO e LUMO
    - Coefficientes dos orbitais moleculares HOMO e LUMO
    - Efeito da conjugação pi na estrutura das moléculas orgânicas
    - Hiperconjugação: efeitos conformacionais e configuracionais
- Reações Iônicas
  - Ácidos e bases duros e moles em química orgânica

- 
- 3.2. Nucleofilicidade
  - 3.3. Nucleófilos ambidentados
  - 3.4. Eletrofilicidade
  - 3.5. Eletrófilos ambidentados
  4. As reações pericíclicas
    - 4.1. Reações de ciclo-adição
    - 4.2. Reações de eletrociclicização
    - 4.3. Reações sigmatrópicas
    - 4.4. Reações queletrópicas
  5. Métodos de estudos dos mecanismos
  6. Estudos de intermediários reativos
    - 6.1. Isolamento de intermediários
    - 6.2. Detecção de intermediários
    - 6.3. Captura de intermediários
- 

#### **METODOLOGIA DE ENSINO-APRENDIZAGEM**

---

A disciplina é ministrada em um período, perfazendo o total de 4h semanais. O caráter é teórico e a disciplina é ministrada através de aulas expositivas e seminários.

---

#### **AVALIAÇÃO DA APRENDIZAGEM**

---

A disciplina será avaliada através de notas de verificações escritas, seminário e relatórios de atividades.

---

#### **REFERÊNCIAS**

---

##### **Bibliografia Básica**

1. FLEMING, I., Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions. Student Edition, John Wiley & Sons, London, 2009.
2. SMITH, M. B. March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure; 7<sup>th</sup>. ed., John Wiley & Sons, New York, 2013.
3. CAREY, F. A.; SUNDBERG, R. J., Advanced Organic Chemistry, Part A: Structure and Mechanisms, 5<sup>th</sup>. ed. Plenum Press, New York, 2007.
4. ANSLYN, E.; V., DOUGHERTY, D. A., Modern Physical Organic Chemistry, University Science Books, Salsalito, 2006.
5. Bruckner, R., Organic Mechanisms, Springer, 2010.

##### **Bibliografia Complementar**

6. Artigos de revistas científicas: The Journal of Organic Chemistry, Química Nova, Journal of American Chemical Society, The Journal of Brazilian Chemical Society
  7. Alabugin, I. V., Stereoelectronic Effects: A Bridge Between Structure and Reactivity, Wiley, 2016.
- 

**Aprovado em reunião de Departamento de Química Orgânica em 19/10/2023**

Assinatura do Chefe do Departamento

---