



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos
Programa de Pós-Graduação em Química

FORMULÁRIO DE PROGRAMA ANALÍTICO E EMENTA DE DISCIPLINAS DE PÓS-GRADUAÇÃO

Disciplina: Química Orgânica Avançada
Código da Disciplina: 1658081
Departamento (se houver):
Sigla da Unidade: CCQFA
Professor Responsável: Raquel Guimarães Jacob
Matrícula SIAPE: 2520965

Outros Professores Envolvidos	SIAPE
André Francisco Pivato Biajoli	2314798
Diego da Silva Alves	1730295
Eder João Lenardão	1057436
Gelson Perin	1474955
Márcio Santos da Silva	1129321
Wilson João Cunico Filho	1652662

Semestre Letivo

(X) I Semestre
(X) II Semestre
Número de Créditos Total: 4
Número de Créditos Teóricas: 4
Número de Créditos Exercício: 0
Número de Créditos Prática: 0

Pré-Requisitos: Não há.
Ementa: Esta disciplina visa aprofundar os conhecimentos no estudo das principais Reações dos Compostos Orgânicos, enfocando os conceitos de ligação química e teoria estrutural; Teoria dos orbitais moleculares, as regras de Woodward-Hoffman, as reações pericíclicas e Aromaticidade. A relação entre reatividade, estrutura, parâmetros cinéticos e termodinâmicos como base para o estudo dos mecanismos das reações orgânicas. Ácidos, bases e catálise em química orgânica; Intermediários reativos. Mecanismos limites e intermediários das reações de substituição nucleofílica.

Cursos Para os Quais é Ministrada	Legenda (O.A.) - Obrigatória (O.P.) - Optativa (A.C.) - Área de Concentração (D.C.) - Área de Domínio Conexo Obs: marque todas aplicáveis para cada curso.			
	(O.A.)	(O.P.)	(A.C.)	(D.C.)
Mestrado em Química	X			
Doutorado em Química	X			

Programa Analítico	
Unidades e Assuntos	Nº de Horas Aula
UNIDADE 1: LIGAÇÃO QUÍMICA E ESTRUTURA MOLECULAR	

<p>1.1 Descrição da Estrutura Molecular pela Teoria da ligação de Valência. 1.1.1 Hibridização, repulsão elétron-elétron. 1.1.2 Eletronegatividade e Polaridade. 1.1.3 Polarizabilidade, dureza e moleza. 1.1.4 Ressonância, conjugação e hiperconjugação.</p> <p>1.2 Teoria dos Orbitais Moleculares e métodos. 1.2.1 Métodos: Hückel, Semi-empírico e Ab Initio. 1.2.2 Aplicação qualitativa da teoria dos OM para a reatividade: Teoria da Perturbação, simetria, interação entre moléculas e Orbitais de fronteira. 1.2.3 Ligação no ciclopropano e outros compostos com anéis pequenos.</p>	16
<p>UNIDADE 2: REAÇÕES PERICÍCLICAS</p> <p>2.1. As regras de Woodward-Hoffman.</p> <p>2.2. Teoria dos Orbitais de Fronteira.</p> <p>2.3. Reações Eletrocíclicas.</p> <p>2.4. Reações de Ciclo-Adição. 2.4.1. Cicloadição [2+2]. 2.4.2. Cicloadição [2+4] – Reação Diels-Alder. 2.4.2.1. Estereoquímica; Efeito dos substituintes na reatividade, regioseletividade e estereoquímica. 2.4.2.2. Reações Diels-Alder intramolecular.</p> <p>2.5. Reações de Ciclo-adição [1,3]-dipolar. 2.5.1. Reatividade relativa; Regioseletividade, estereosseletividade e estruturas de transição. 2.5.2. Aplicações e Catálise.</p> <p>2.6. Rearranjos Sigmatrópicos. 2.6.1. Rearranjos sigmatrópicos [1,3]-, [1,5]- e [1,7]- de hidrogênio e grupos alquila. 2.6.2. Rearranjo sigmatrópico [3,3]. 2.6.3. Rearranjo Sigmatrópico [2,3].</p>	16
<p>UNIDADE 3: AROMATICIDADE.</p> <p>3.1. Critérios de aromaticidade: Energéticos, estruturais, eletrônicos e a relação entre eles. 3.2. Os anulenos. 3.3. Aromaticidade em anéis carregados. 3.4. Homoaromaticidade. 3.5. Sistemas de anéis fundidos. 3.6. Sistemas Heteroaromáticos.</p>	8

UNIDADE 4: ESTUDO DAS REAÇÕES ORGÂNICAS

4.1. Estrutura, Reatividade e Estabilidade.

4.1.1. Efeito Eletrônico do Substituinte – A Equação de Hammett.

4.2. Introdução ao Mecanismo das reações orgânicas.

4.2.1. Parâmetros Termodinâmicos (DG, DH e DS).

4.2.2. Parâmetros Cinéticos.

4.2.3. Controle cinético x controle termodinâmico.

4.2.4. Postulado de Hammond's.

4.2.5. Correlação entre aspectos termodinâmicos e cinéticos das reações.

4.2.6. Princípio de Curtin-Hammett.

4.3. Intermediários reativos.

4.3.1. Carbocátions.

4.3.1.1. Estrutura e estabilidade de carbocátions.

4.3.1.2. Estrutura e Reações de carbocátions.

4.3.1.3. Reações de competição entre carbocátions.

4.3.1.4. Rearranjo de carbocátions.

4.3.1.5.. Carbocátions não-clássicos.

4.3.2. Carbânions.

4.3.2.1. Estrutura e estabilidade de carbânions.

4.3.2.2. Carbânions estabilizados por Grupos funcionas.

4.3.2.3. Compostos organometálicos como carbânions.

4.3.2.4. Enols e enaminas como carbânions.

4.3.3. Radicais Livres.

4.3.3.1. Estrutura e estabilidade de radicais livres.

4.3.3.2. Geração de radicais livres.

4.3.3.3. Propriedades estruturais e estereoquímicas.

4.3.3.4. Efeito de substituintes na estabilidade de radicais livres.

4.3.3.5. Radicais carregados.

4.3.4. Carbenos e outros intermediários reativos.

4.4. Efeito do Solvente.

4.5. Efeito Isotópico.

4.6. Ácidos, Bases e Catálise.

4.6.1. Ácidos e Bases de Bronsted.

4.6.1.1. Força de Ácidos e Bases de Bronsted.

4.6.1.2. Efeito dos substituintes na força de ácidos e bases.

4.6.2. Ácidos e Bases de Lewis.

4.6.2.1. Força de Ácidos e Bases de Lewis.

4.6.3. Catálise por ácidos e bases.

4.6.4. Acidez de Hidrocarbonetos.

4.6.7. Conceito de dureza e moleza para ácidos e bases.

16

UNIDADE 5: REAÇÕES DESUBSTITUIÇÃO NUCLEOFÍLICA

5.1. Mecanismo para a Substituição Nucleofílica:

5.1.1. S_N1, S_N2 e mecanismos intermediários.

5.1.2. Relação entre estereoquímica e mecanismo de substituição.	12
5.2. Efeito Estrutural e de solvatação na reatividade.	
5.2.1. Efeito da solvatação na nucleofilicidade.	
5.2.2. Efeito do Grupo de saída.	
5.2.3. Efeito estérico e de tensão na substituição e na velocidade de ionização.	
5.2.4. Efeito da conjugação na reatividade.	
5.3. Participação do Grupo vizinho.	

Referências Bibliográficas	
Referências	Nº de Ordem
CAREY, F. A.; SUNDBERG, R. J., Advanced Organic Chemistry, Part A: Structure and Mechanisms. Part B: Reactions and Synthesis, 4rd ed., Plenum Press, New York, 2004.	1
CARRUTHERS, W., Some modern methods of organic synthesis, 3th ed., Cambridge, New York, 1987.	2
CLAYDEN, GREEVES, WARREN & WOTHERS, Organic Chemistry, Oxford University Press, Oxford, 2001.	3
HOUSE, H.O. Modern synthetic reactions, W. A. Benjamin Inc., London, 1972.	4
LOWRY, T. H.; RICHARDSON, K. S. Mechanism and Theory in Organic Chemistry, 3rd ed., Harper & Row, New York, 1987.5	5
MARCH, J. Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms and Structure, 4th ed., McGraw-Hill, New York, 1992.	6
MILLER, B. Advanced Organic Chemistry - reactions and mechanisms, Prentice-Hall, Upper Saddle River, 1998.	7
WADE, Jr. L. G. Organic Chemistry, 4rd ed., Prentice-Hall, New Jersey, 1999.	8
VOLLHARDT & SCHORE, Organic Chemistry, Structure and Function, third ed., W.H. Freeman and Company, New York, 2000.	9

IMPORTANTE: Além do correto preenchimento do Programa Analítico, é obrigatório anexar

a Ata do Departamento e a Ata do Colegiado, bem como o memorando explicando a solicitação desejada. Caso contrário, não será possível realizar o cadastro.



Documento assinado eletronicamente por **RAQUEL GUIMARAES JACOB, Professor do Magistério Superior/Assoc./Tit.**, em 17/08/2018, às 15:43, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **GELSON PERIN, Professor do Magistério Superior/Assoc./Tit.**, em 18/08/2018, às 15:53, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufpel.edu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0243062** e o código CRC **D095A3F0**.