

## SÚMULA DA DISCIPLINA

### 1. Identificação

Código e nome da disciplina: QUP 302 - Química Orgânica Avançada

Professores responsáveis: Fabiano Severo Rodembusch, Diogo Seibert Lüdtke e Angélica Venturini Moro

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 45 h

Créditos: 3 (três)

Revisado e atualizado em: Agosto\_2019

### 2. Ementa

Fundamentos físico-químicos aplicados para elucidação de mecanismos de reações orgânicas; efeitos conformacionais e reatividade química em sistemas cíclicos e acíclicos.

### 3. Objetivo

Aprofundar o conhecimento do pós-graduando em Química Orgânica, através da abordagem ampliada de fundamentos físico-químicos para elucidação de mecanismos de reações. Discutir conceitos e modelos avançados frente à compreensão das estruturas, propriedades e da reatividade de compostos orgânicos.

### 4. Conteúdo Programático

4.1 Velocidade de reações simples e complexas e equilíbrio químico. Significado físico dos parâmetros de ativação. Aproximação do estado estacionário para reações orgânicas. Princípio de Hammond. Princípio de Curtin-Hammett. Etapa determinante de reação e composição do complexo ativado. Diagramas de More O'Ferral. Efeitos catalíticos - catálise ácida e básica específica e geral. Catálise por nucleófilo. Origem do efeito isotópico molecular. Efeito cinético isotópico primário e secundário do deutério. Efeito cinético isotópico no solvente. Solvatação e efeito do solvente nas reações químicas.

4.2 Efeitos conformacionais e reatividade química de compostos orgânicos – efeitos estéricos, eletrônicos e estereo-eletrônicos em sistemas acíclicos e sistemas cíclicos - aplicação dos conceitos desenvolvidos no item 4.1 em reações de substituição nucleofílica alifática, adição eletrofílica, eliminações beta, adição de nucleófilos e hidrólise de derivados carbonílicos.

4.3 Processos de enolização, modelo de Ireland, modelos de adição ao grupo carbonila e estados de transição Zimmerman-Traxler em compostos carbonílicos.

### 5. Avaliação

O aluno será avaliado através de 3 (três) avaliações, referentes a cada área da disciplina (4.1, 4.2 e 4.3) através de lista de exercícios, apresentação e discussão de artigos científicos, provas teóricas e/ou trabalhos dirigidos. Será considerado aprovado o aluno que obtiver pelo menos conceito "C" em cada uma das três áreas. O aluno que não atingir conceito "C" em uma área,

deverá realizar um exame versando sobre o conteúdo desta área. Para apropriação final do conceito será utilizada a relação:

A - Ótimo (90 a 100%)

B - Bom (75% a 89%)

C - Regular (60 a 74%)

D - Insuficiente (abaixo de 60%)

FF - Sem frequência

#### **6. Método de Trabalho/Ensino**

Aulas teórico-expositivas e/ou vídeoaulas.

#### **7. Bibliografia**

- J. March, *Advanced Organic Chemistry. Reactions, Mechanism and Structure*, 4<sup>a</sup> Ed. New York: John Wiley & Sons, 1992.
- F. Carey and R.J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry. Part A and B*. 3<sup>a</sup> Ed. New York; Plenum Press, 1990.
- F. Carey and R.J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry. Part A and B*. 4<sup>a</sup> Ed. New York; Plenum Press, 2000.
- T. Lowry and K.S. Richardson, *Mechanism and Theory in Organic Chemistry*. New York: Harper e Row Publ., 1987.
- J. Hine, *Physical Organic Chemistry*. McGraw-Hill Editor, 1962.
- I. Fleming, *Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions*, John Wiley & Sons, 1986.
- N. Issacs, *Physical Organic Chemistry*, 2nd edition, Longman Scientific & Technical, 1995.
- Eric V. Anslyn, Dennis A. Dougherty (Authors), *Modern Physical Organic Chemistry*, University Science; illustrated edition edition (July 15, 2005).