

## SÚMULA DA DISCIPLINA ENSINO REMOTO EMERGENCIAL

### 1. Identificação

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

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

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 45 h

Créditos: 3 (três)

Revisado e atualizado em: Fevereiro\_2021

### 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

- 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.

- 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.

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

### 5. Avaliação

Lista de exercícios, apresentação e discussão de artigos científicos, provas teóricas e/ou trabalhos dirigidos. Será considerado aprovado o aluno que obtiver conceito final A, B ou C, atribuídos conforme relação abaixo:

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**

As aulas teórico-expositivas serão ministradas via MConf (síncronas) ou gravados e disponibilizadas aos discentes (assíncronas) via MConf, Youtube, etc. Materiais adicionais, tais como estudos dirigidos, slides das aulas, listas de exercícios, etc. serão enviados aos alunos via Sala de Aula Virtual, Moodle e/ou email.

### **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).