

Química Orgânica

Créditos: 04

Carga Horária: 60 horas

Ementa: Ligações Covalentes das Substâncias Orgânicas: Teoria do Orbital Molecular, Teoria dos Orbitais Moleculares de Fronteira e Teoria da Ligação de Valência. Ácidos e Bases em Química Orgânica: Efeito do Solvente no Equilíbrio Ácido-Base e A Equação de Hammett e Taft. Aspectos em Estereoquímica e Análise Conformacional: Introdução aos Modelos de Estereosseletividade e Aspectos Computacionais para a Análise Conformacional.

Programa:

1. Ligações Covalentes das Substâncias Orgânicas.

- Teoria de Lewis: Construção de Moléculas, Carga Formal e Carga Parcial (Carga de Langmuir-Lewis);
- Mecânica Ondulatória: Equação de Schrödinger;
- A Teoria da ligação de Valência: Orbitais Híbridos, Ligações Localizadas, Ligações Deslocalizadas, Forças de Ligação, Comprimento de Ligação, Ângulos de Ligação, Momento Dipolar, Ligações de Hidrogênio e Hiperconjugação;
- Teoria dos Orbitais Moleculares: Ligação do H₂ e a Teoria dos Orbitais Moleculares de Fronteira (HOMO e LUMO). Orbitais Moleculares do Etano, Eteno e Etino. Aromaticidade do Benzeno, entre outros;
- Estabilidade relativa de Cátions e Ânions: Efeito Polar, Ressonância e Hiperconjugação;
- Aromaticidade de Cátions e Ânions;
- Íons Clássicos e Não-Clássicos: Íons Halônios, Fenônio, Norbornenila e Norbornila;
- Aspectos Computacionais para a Hiperconjugação e Estabilidade de Cátions: Comparações das Metodologias Semi-Empíricas, *Ab-Initio* e DFT.

2. Ácidos e Bases em Química Orgânica.

- Conceitos de Acidez e Basicidade: As Teorias de Bronsted-Lowry, de Lewis e de Person (Ácidos Duros e Moles);
- Acidez Intrínseca na Fase Gasosa e o Efeito do Solvente no Equilíbrio Ácido-Base;
- Aspectos Quantitativos da relação Estrutura-Acidez: a Equação de Hammett e Taft.

3. Aspectos em Estereoquímica e Análise Conformacional

- Elementos de Simetria : Plano (σ), Eixo (C_n) e Centro de Simetria (i);
- Enantiômeros, Diastereoisômeros, Configuração Relativa *versus* Absoluta;
- Pró-quiralidade: Faces e Grupos;
- Aspectos em Análise Conformacional de Sistemas Acíclicos, Monocíclico e Bicíclicos: Efeito Estereoeletrônico no Equilíbrio Conformacional;
- Ajuda Computacional via Mecânica Molecular na busca da Conformação mais Estável;
- Efeito Anomérico;
- Introdução aos Modelos de Estereosseletividade: O Modelo de Cram e de Felkin-Anh;

- Aspectos Computacionais para a Análise Conformacional: uso de Metodologias Semi-Empírica, *Ab-Initio* e DFT na Determinação de Máximos e Mínimos Conformacionais.

Referências Bibliográficas:

- Carey F. e Sundberg R., **Advanced Organic Chemistry – Structure and Mechanism-Part A**, 4^a ed., Plenum Press, New York, 2000.
- Smith M.B. e March, **Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanism, and Structure**, 5^a ed., John Wiley & Sons, New York, 2001.
- Costa Ferreira, E. e Vasconcellos M., **Ácidos e Bases em Química Orgânica**, 1^a ed., Bookman, 2005.
- Miller B., **Advanced Organic Chemistry: Reactions and Mechanisms**, Prentice Hall, New York, 1998.
- Eliel E.E. e Wilen S.H., **Stereochemistry of Organic Compounds**, 2a ed., John Wiley & Sons, New York, 1994.
- Maskill H., **The Physical Basis of Organic Chemistry**, Oxford Science Publications, 1993.
- Reichardt C., **Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry**, 2^a ed., VCH, 1990.
- Fleming Ian, **Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions**, John Wiley & Sons, New York, 1982.
- Rauk A., **Orbital Interaction Theory of Organic Chemistry**, 2^a ed., John Wiley & Sons, New York, 2001.
- Sykes P., **Guidebook to Mechanism of Organic Chemistry**, 6^a ed., Cambridge, 1985.
- Costa, Pilli, Pinheiro e Vasconcellos, **Substâncias Carboniladas e Derivados**, Bookman, 2003.
- Kirby A.J., **Stereoelectronic Effects**, Oxford Science Publications, number 36, 1996.
- Maskill H., **Mechanism of Organic Reactions**, Oxford Science Publications, number 45, 1996.
- Maskill H., **Structure and Reactivity in Organic Chemistry**, Oxford Science Publications, number 81, 1999.
- Fleming Ian, **Pericyclic Reactions**, Oxford Science Publications, number 67, 1999.
- Artigos recentes da literatura.