



**PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS**

<b>Disciplina</b>	
<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QO321	Química Orgânica I

<b>Vetor</b>
OF:S-5 T:004 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:004 SL:004 C:004 AV:N EX:S FM:75%

<b>Pré-Req</b>
QG101 QG102/ QG108

<b>Ementa</b>
Introdução da disciplina: alguns aspectos históricos e de teoria estrutural. Estrutura Eletrônica e Ligação Química. Estruturas Orgânicas. Reações Orgânicas. Alcanos. Reações de alcanos. Estereoquímica. Haletos de alquila e organometálicos. Estrutura e propriedades físicas de haletos de alquila. Uso de hidrocarbonetos halogenados, nomenclatura e estrutura de substâncias organometálicas, propriedades físicas e preparação de organometálicos, reações de organometálicos. Substituição nucleofílica e eliminações. Álcoois e éteres. Alcenos (alquenos). Alcinos (alquinos) e nitrilas.

<b>Programa</b>
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Introdução à disciplina: Química orgânica como ciência, alguns aspectos históricos e de teoria estrutural.</li><li>2. Estrutura Eletrônica e Ligação Química:<ol style="list-style-type: none"><li>a) Teoria estrutural da química orgânica;</li><li>b) Ligações químicas, regra do octeto;</li><li>c) Estruturas de Lewis, carga formal;</li><li>d) Estruturas de Ressonância;</li><li>e) Orbitais Atômicos e orbitais moleculares;</li><li>f) Orbitais Híbridos e suas ligações;</li><li>g) Geometria molecular.</li></ol></li><li>3. Compostos orgânicos<ol style="list-style-type: none"><li>a) Grupos funcionais;</li><li>b) Ligações químicas: ligações covalentes apolares e polares, eletronegatividades, dipolos;</li><li>c) Interações intermoleculares.</li></ol></li><li>4. Introdução às reações orgânicas. Acidez e basicidade<ol style="list-style-type: none"><li>a) Exemplos de uma reação orgânica, equilíbrios.</li><li>b) Reações ácido-base, ácidos e bases de Bronsted e de Lewis;</li><li>c) A força de ácidos e bases, <math>K_a</math> e <math>pK_a</math>;</li><li>d) Equilíbrio ácido-base;</li><li>e) Relação entre acidez-basicidade e estrutura.</li></ol></li><li>5. Alcanos<ol style="list-style-type: none"><li>a) n-Alcanos: nomenclatura, propriedades físicas;</li><li>b) n-Alcanos: barreiras de rotação ao longo das ligações C-C, conformações;</li><li>c) Alcanos ramificados;</li><li>d) Cicloalcanos: tensão anelar, tensão torcional e tensão estérica, conformações de cicloalcanos;</li><li>e) Calores de formação e energia de dissociação das ligações;</li><li>f) Ocorrência de alcanos;</li></ol></li></ol>

g) Reações de alcanos: pirólise; halogenação radicalar, estabilidade de radicais, combustão.

#### 6. Estereoquímica

- a) Isomerismo: isômeros constitucionais e estereoisomerismo;
- b) Quiralidade, importância de quiralidade em sistemas biológicos;
- c) Enantiômeros
- d) Nomenclatura de enantiômeros: o sistema R e S
- e) Propriedades de moléculas quirais: atividade óptica, pureza ótica;
- f) Racematos;
- g) Substâncias contendo mais do que um estereocentro: diastereoisômeros;
- f) Projeções de Fischer;
- g) Estereoquímica em sistemas cíclicos;
- h) Faces pró-quirais: face Re e face Si;
- i) Reações químicas e estereoisomerismo.

#### 7. Haletos de Alquila. Substituição nucleofílica e eliminações

- a) Estrutura e propriedades de haletos de alquila;
- b) Uso de hidrocarbonetos halogenados, dipolos, polarizabilidade;
- c) A reação de deslocamento: nucleófilos, eletrófilos, grupo abandonador;
- d) Reação de  $S_N2$ : mecanismo, diagrama de energia livre; estado de transição;
- e) O efeito da estrutura do haleto de alquila no processo de deslocamento;
- f) O efeito da estrutura do nucleófilo no processo de deslocamento; basicidade e nucleofilicidade;
- g) O efeito do solvente;
- h) O efeito do grupo de saída;
- i) Reação de  $S_N1$ : mecanismo; estados de transição e intermediários, diagrama de energia livre;
- j) Estabilidade de carbocátions;
- k) Reações de eliminação e efeito da temperatura; reações competitivas;
- l) Reações de substituição e eliminação em sistemas cíclicos.

#### 8. Alquenos e alquinos

- a) Estrutura eletrônica; nomenclatura, estereoisomeria: sistema E e Z em alquenos; propriedades físicas;
- b) Estabilidade relativa dos alquenos: calores de hidrogenação
- c) Cicloalquenos, estabilidade relativa;
- d) Preparação de alquenos: reações de eliminação E2 e E1, desidroalogenação, desidratação;
- e) Preparação de alquinos: desalogenação de haletos vicinais e geminais. Reações de alquinos. Acidez e uso em reações de formação de ligação carbono-carbono;
- f) Reações de alquenos e alquinos: adição de hidrogênios syn e anti;
- g) Reações de adição: adições de haletos de alquila, regra Markovnikov, estereoquímica da adição; hidratação, rearranjo de carbocátions; adição de halogênios, estereoquímica; reações regiosseletivas; formação de halodrinhas;
- h) Oxidações: dihidroxilação, clivagem oxidativa, epoxidação; formação de ciclopropanos: carbenos.

#### 9. Álcoois e Éteres

- a) Estrutura, nomenclatura e propriedades físicas dos álcoois e éteres. Fontes industriais de álcoois mais comuns;
- b) Acidez dos álcoois;
- c) Preparação de álcoois: transformação de grupos funcionais; formação de novos esqueletos carbônicos;
- d) Reações de álcoois: eliminações, substituições, adições, oxidações;
- e) Preparação de éteres;
- f) Reações de éteres;
- g) Éteres cíclicos, epóxidos.

**Bibliografia**

1. Solomons, G.; Fryhle, C. "Organic Chemistry", 8<sup>th</sup> ed., 2004; John Wiley & Sons Inc.: NY;
2. Streitweiser, A.; Heathcook, C.H.; Kosower, E.M. "Introduction to Organic Chemistry", 4<sup>th</sup> ed., 1992; MacMillan Publis. Comp.: NY;
3. Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S.; Wothers, P. "Organic Chemistry", 2004; Oxford Univ. Press: Oxford;
4. Carey, F. A. "Organic Chemistry", 5<sup>th</sup> ed., 2003; McGraw-Hill, Inc.: NY.

**Cr terios de Avalia o**

Cr terios de avalia o definidos pelo Professor, com base no disposto na Se o I – Normas Gerais, Cap tulo V – Da Avalia o do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Gradua o. Frequ ncia: 75 % (\* O abono de faltas ser  considerado dentro do previsto no cap tulo VI, se o X, artigo 72 do Regimento Geral de Gradua o)