



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

Disciplina	
Código	Nome
QO858	Introdução à Físico-Química Orgânica

Vetor
OF:S-6 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req
QO521

Ementa
Estrutura e modelos de ligação química, Termodinâmica e estabilidade de compostos orgânicos, Análise conformacional e estereoquímica, Superfícies de energia potencial e análise cinética de reações orgânicas, Ferramentas de estudos de mecanismos de reação e suas aplicações em reações de adição e eliminação, reações de substituição e rearranjos; Introdução à cálculos teóricos para entendimento de estrutura e reatividade de compostos orgânicos.

Programa
<ol style="list-style-type: none">1. Estrutura e modelos de ligação química2. Termodinâmica e estabilidade de compostos orgânicos<ol style="list-style-type: none">a) Entalpia, entropia e energia livre de Gibbsb) Termodinâmica de compostos orgânicos estáveis e intermediários reativos3. Análise conformacional<ol style="list-style-type: none">a) Efeitos estéricos e eletrostáticos e estereoeletrônicosb) Métodos espectroscópicos em análise conformacional4. Superfícies de energia potencial e análise cinética de reações orgânicas<ol style="list-style-type: none">a) Teoria do estado de transiçãob) Postulados e princípios relacionados com cinética de reaçõesc) Análise de cinética para mecanismos simples5. Ferramentas relacionadas ao estudos de mecanismos de reação<ol style="list-style-type: none">a) Efeitos isotópicos cinéticosb) Relações lineares de energia livrec) Experimentos para estudo de mecanismos de reações6. Aplicações em reações de adição, substituição e rearranjos7. Introdução à cálculos teóricos para entendimento de estrutura e reatividade de compostos orgânicos.<ol style="list-style-type: none">a) Métodos de química computacionalb) Cálculos de propriedades estruturais e espectroscópicasc) Natural Bond Orbitals (NBO)d) Quantum theory of atoms in molecules (QTAIM)

Bibliografia

1. Anslyn, E. V.; Dougherty, D. A. *Modern physical organic chemistry*. University Science: California, 2006.
2. Carroll, F. A. *Perspectives on Structure and Mechanism in Organic Chemistry*. 2nd Ed., Wiley, New Jersey, 2011.

Critérios de Avaliação

Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)