

Código: Q0321								
Nome: Química Orgânica I								
Nome em Inglês: Organic Chemistry I								
Nome em Espanhol: Química Orgánica I								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / Todos os períodos								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
4	-	-	-	-	-	4	15	4
Ocorrência nos Currículos: 05, 50, 56, 63								
Pré-requisitos: QG101 + QG102 ou QG108								
<p>Ementa: 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.</p>								
<p>Programa:</p> <p>1. Introdução à disciplina:</p> <p>Química orgânica como ciência, alguns aspectos históricos e de teoria estrutural.</p> <p>2. Estrutura Eletrônica e Ligação Química:</p> <p>a) Teoria estrutural da química orgânica; b) Ligações químicas, regra do octeto; c) Estruturas de Lewis, carga formal; d) Estruturas de Ressonância; e) Orbitais Atômicos e orbitais moleculares; f) Orbitais Híbridos e suas ligações; g) Geometria molecular.</p> <p>3. Compostos orgânicos</p> <p>a) Grupos funcionais; b) Ligações químicas: ligações covalentes apolares e polares, eletronegatividades, dipolos; c) Interações intermoleculares.</p> <p>4. Introdução às reações orgânicas. Acidez e basicidade</p> <p>a) Exemplos de uma reação orgânica, equilíbrios. b) Reações ácido-base, ácidos e bases de Bronsted e de Lewis; c) A força de ácidos e bases, Ka e pKa; d) Equilíbrio ácido-base; e) Relação entre acidez-basicidade e estrutura.</p> <p>5. Alcanos</p>								

- a) n-Alcanos: nomenclatura, propriedades físicas;
- b) n-Alcanos: barreiras de rotação ao longo das ligações C-C, conformações;
- c) Alcanos ramificados;
- d) Cicloalcanos: tensão anelar, tensão torcional e tensão estérica, conformações de cicloalcanos;
- e) Calores de formação e energia de dissociação das ligações;
- f) Ocorrência de alcanos;
- 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 SN₂: 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 SN₁: 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 haloidrinas;
- 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 básica

- 1) MCMURRY, J. "**Organic chemistry**", 9ª edição, Cengage Learning, Nova Iorque, 2015. ISBN: 978-1-305080-485
- 2) LOUDON, M. e PARISE, J. "**Organic chemistry**", 7ª edição, W. H. Freeman, Nova Iorque, 2021. ISBN: 978-1-319188-429
- 3) WADE, L. e SIMEK, J. W. "**Organic chemistry**", 9ª edição, Pearson Education, Minneapolis, 2016. ISBN: 978-0-321971-371

Bibliografia complementar

- 1) CLAYDEN, J.; GREEVES, N. E. WARREN, S. "**Organic chemistry**", 2ª edição, Oxford University Press, Florença, 2012. ISBN: 978-0-199270-293
- 2) MCMURRY, J. E. e BEGLEY, T. P. "**Organic chemistry of biological pathways**", 2ª edição, W. H. Freeman, Pacific Grove, 2015, ISBN: 978-1-936221-561
- 3) ARPE, H. J. "**Industrial organic chemistry**", 5ª edição, Wiley, New Jersey, 2010. ISBN: 978-3-527-32002-8
- 4) KLEIN, D. "**Organic chemistry**", 4ª edição, Wiley, New Jersey, 2020. ISBN: 978-1-119659-594
- 5) BROWN, W. H.; IVERSON, B. L.; ANSLYN, E. E. FOOTE, C. S. "**Organic chemistry**", 9ª edição, Cengage Learning, Nova Iorque, 2022. ISBN: 978-0-357451-861