

Código: Q0323								
Nome: Química Orgânica I (Engenharia Química)								
Nome em Inglês: Organic Chemistry I (Chemical Engineering)								
Nome em Espanhol: Química Orgánica I (Ingeniería Química)								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / 1º Período - períodos ímpares								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
4	-	-	-	-	-	4	15	4
Ocorrência nos Currículos: 09								
Pré-requisitos: QG101 ou QG107								
Ementa: Orbitais híbridos. Hidrocarbonetos. Petróleo. Benzeno e derivados. Haletos orgânicos. Álcoois. Éteres. Ácidos carboxílicos e derivados. Aldeídos e cetonas. Aminas. Compostos heterocíclicos. Polímeros. Noções de estereoquímica.								
Programa:								
1. Introdução à disciplina: Química orgânica como ciência, alguns aspectos históricos e de teoria estrutural.								
2. Estrutura Eletrônica e Ligação Química:								
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.								
3. Compostos orgânicos								
a) Grupos funcionais;								
b) Ligações químicas: ligações covalentes apolares e polares, eletronegatividades, dipolos;								
c) Interações intermoleculares.								
4. Introdução às reações orgânicas. Acidez e basicidade								
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.								

5. Alcanos

- 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.
- h) Petróleo.

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;
- h) Projeções de Fischer;
- i) Estereoquímica em sistemas cíclicos;
- j) Faces pró-quirais: face Re e face Si;
- k) 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 regioseletivas; formação de haloidrinas;

- h) Oxidações: dihidroxilação, clivagem oxidativa, epoxidação; formação de ciclopropanos: carbenos.
- i) Polímeros: principais classes de polímeros e reações de polimerização.

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.

10. Aldeídos e cetonas.

- a) Estrutura e Propriedades.
- b) Ocorrência e uso.
- c) Descrição do grupo carbonila pela teoria de valência e teoria de orbitais moleculares.
- d) Métodos gerais de preparação de aldeídos e cetonas.
- e) Adição de nucleófilos de oxigênio e nitrogênio à aldeídos e cetonas: formação de hidratos, cetais e hemicetais, iminas, enaminas e compostos relacionados.
- f) Adição de nucleófilos de carbono: ácido cianídrico, reagentes organometálicos (reação de Grignard), ilídeos de fósforo (reação de Wittig) e fosfonatos.
- g) A influência de substituintes sobre a reatividade de aldeídos e cetonas.
- h) Aspectos estereoquímicos da adição de nucleófilos a aldeídos e cetonas.
- i) Métodos de redução e oxidação de aldeídos e cetonas: oxidação de Baeyer-Villiger, oxidação por compostos de Cr(VI), redução por hidretos metálicos, hidrogenação catalítica, reação de Clemmensen, reação de Wolff-Kishner.

11. Ácidos carboxílicos.

- a) Estrutura e propriedades.
- b) Ocorrência e uso.
- c) Acidez.
- d) Efeitos indutivo e eletrônico sobre a acidez de ácidos carboxílicos.
- e) Formação de sais, sabões, detergentes e tensoativos.
- f) Reações de esterificação.
- g) Formação de haletos de acila, anidridos, ésteres e amidas.
- h) Redução do grupo carboxílico.

12. Derivados de ácidos carboxílicos: ésteres, amidas, haletos de acila, anidridos de ácidos carboxílicos.

- a) Estrutura e propriedades.
- b) Ocorrência e uso.
- c) Descrição pela teoria de ligação de valência e pela teoria de orbitais moleculares.
- d) Mecanismo geral da adição de nucleófilos a ácidos carboxílicos e derivados.
- f) A reação de hidrólise.
- g) Reações possíveis de interconversão dos derivados.
- h) A acidez do hidrogênio alfa em ácidos carboxílicos e derivados.
- i) A formação de enolatos, reação de alquilação e reação aldólica.
- j) A adição de organometálicos a ácidos carboxílicos e derivados.

13. Benzeno e derivados.

- a) Aspectos históricos.
- b) Estrutura, nomenclatura e propriedades.
- c) A energia de ressonância.
- d) Descrição pela teoria de ligação de valência e pela teoria dos orbitais moleculares.
- e) A regra de Hückel.
- f) Reações nas cadeias laterais de compostos aromáticos: SN2, SN1, hidrogenólise, oxidação.
- g) Redução de Birch.

14. Reações de substituição eletrofílica aromática

- a) Reações de halogenação, nitração, sulfonação, alquilação e acilação de Friedel-Crafts.
- b) Efeitos de orientação em SEAr.
- c) Efeitos de múltiplos substituintes.

15. Aminas

- a) Estrutura e propriedades.
- b) Fontes e uso.
- c) Basicidade e formação de sais.
- d) Formação de iminas e enaminas.
- e) Métodos de preparação: alquilação, redução de nitrocompostos, nitrilas, azidas, iminas e oximas.
- f) A aminação redutiva.
- g) Os rearranjos de Hofmann e de Curtius.
- h) Formação de sais de diazônio.

16. Compostos heterocíclicos: exemplos, propriedades e algumas sínteses.

Bibliografia

- 1) SOLOMONS, G.; FRYHLE, C. **Organic Chemistry**, 8th ed., 2004; John Wiley & Sons Inc.: NY;
- 2) STREITWEISER, A.; HEATHCOOK, C.H.; KOSOWER, E.M. **Introduction to Organic Chemistry**, 4th 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**, 5th ed., 2003; McGraw-Hill, Inc.: NY.