



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre 2023

Disciplina	
Código	Nome
QO858	Introdução à Físico-Química Orgânica

Turmas	Horário	Local
A	Qua: 19/21	IQ02

Docentes

Rodrigo A. Cormanich cormanich@unicamp.br

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações

Descrição: Serão aplicadas duas provas e exercícios extra-classe.

Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações

Descrição: Os exercícios extra-classe terão tempo mínimo de prazo de entrega de duas semanas.

[Os resultados das avaliações serão disponibilizados em até 10 dias úteis.](#)

Critérios de Avaliação e Aprovação

Duas Provas em sala de aula:

P1 (peso 4,0): dia 11/10

P2 (peso 4,0): dia 01/12

Exercícios extra-classe (Exercícios) (Peso 2,0)

Exame: dia 13/12

Frequência mínima = 75%

Da aprovação e da reprovação:

1. Média Final = $(4 \times P1 + 4 \times P2 + 2 \times \text{Seminário}) / 3$

2. Se a Média Final < 5,0 = Exame

3. Ficando para Exame:

Nota Final = (Média Final + Exame) / 2

Se Nota Final > 5,0 = Aprovado

Se Nota Final < 5,0 = Reprovado

Forma de Atendimento Extra-Classe

Descrição: Horários para esclarecimento de dúvidas serão marcados em comum acordo com os alunos, dependendo da disponibilidade de horário dos alunos e do professor.

Calendário

Data	Atividade
09/08	Início das aulas
25/10	Afastamento docente – Não haverá aula
11/10	Prova 1
01/12	Prova 2
13/12	Exame

Art. 58 do Regimento Geral de Graduação: O Exame deverá ser realizado no período previsto pelo Calendário Escolar e deverá estar agendado para o mesmo dia da semana e horário em que são ministradas as aulas da disciplina, exceto na ocorrência de feriado ou ponto facultativo.

21 a 25/08 - Semana da Química - não haverá aula para as disciplinas dos cursos 05/50.

07 a 09/09 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

12 a 14/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

17/10 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula

28/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

02 a 04/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

15/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

20/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

08 e 09/12 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

04 a 09/12 - Semana de Estudos

11 a 16/12 - Semana de Exames

Outras informações relevantes

(1) Art. 56 do Regimento Geral de Graduação: São condições para aprovação: II - nas disciplinas em que nota e frequência são adotadas como forma de avaliação – obter **nota final** igual ou superior a 5,0 (cinco vírgula zero) e a frequência mínima estabelecida para a disciplina no Catálogo dos Cursos de Graduação; a frequência mínima de 75%.

(2) **Sobre o Abono de Faltas:** os critérios do Abono de Faltas são definidos pelo artigo 72, do Regimento Geral de Graduação.

(3) De acordo com a **Deliberação CG 2022/01** sobre **PROVA SUBSTITUTIVA EM CASO DE FALTA JUSTIFICADA POR COVID-19**, a CG estabelece que o exame final poderá substituir a avaliação no dia de faltas abonadas pelo inciso V do artigo 72, exceto se o(a) estudante comprovar que a ausência foi motivada por suspeita ou contágio por COVID-19. Nessas situações – suspeita ou contágio comprovado por COVID-19 – o(a) estudante terá direito a reposição da atividade avaliativa, desde que componha sua média final, em data a ser combinada com o docente responsável, não podendo a prova de exame final ser utilizada para fins de substituição.

(4) Quaisquer alterações no PDE, propostas pelo(a) Docente ou Discentes, no transcorrer do semestre, só poderão ser realizadas mediante a concordância do(a) Docente e Discentes, e autorização da Comissão de Graduação.

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA

Código: QO858								
Nome: Introdução à Físico-Química Orgânica								
Nome em Inglês: Introduction to Physical Organic Chemistry								
Nome em Espanhol: Introducción a la Físico-Química Orgánica								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / A critério da Unidade de Ensino								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
2	-	-	-	-	-	2	15	2
Ocorrência nos Currículos:								
Pré-requisitos: 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:								
1. Estrutura e modelos de ligação química								
2. Termodinâmica e estabilidade de compostos orgânicos								
a) Entalpia, entropia e energia livre de Gibbs								
b) Termodinâmica de compostos orgânicos estáveis e intermediários reativos								
3. Análise conformacional								
a) Efeitos estéricos e eletrostáticos e estereoeletrônicos								
b) Métodos espectroscópicos em análise conformacional								
4. Superfícies de energia potencial e análise cinética de reações orgânicas								
a) Teoria do estado de transição								
b) Postulados e princípios relacionados com cinética de reações								
c) Análise de cinética para mecanismos simples								
5. Ferramentas relacionadas aos estudos de mecanismos de reação								
a) Efeitos isotópicos cinéticos								
b) Relações lineares de energia livre								

c) Experimentos para estudo de mecanismos de reações

6. Aplicações em reações de adição, substituição e rearranjos

7. Introdução à cálculos teóricos para entendimento de estrutura e reatividade de compostos orgânicos.

a) Métodos de química computacional

b) Cálculos de propriedades estruturais e espectroscópicas

c) Natural Bond Orbitals (NBO)

d) Quantum theory of atoms in molecules (QTAIM)

Bibliografia Básica

- 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.
- 3) FLEMING, I. **Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions**

Bibliografia Complementar

- 1) ALABUGIN, I. *Stereoelectronic Effects: A Bridge Between Structure and Reactivity*, John Wiley & Sons, 2016.
- 2) GROSSMAN, R. *The Art of Writing Reasonable Organic Reaction Mechanisms*, Springer, 2019.
- 3) CAREY, F.; SUNDBERG, R. *Advanced Organic Chemistry: Part A: Structure and Mechanisms*, 5a ed., Springer, 2006.
- 4) HEHRE, W. J.; SHUSTERMAN, A. J.; NELSON, J. E. *The Molecular Modelling Workbook for Organic Chemistry*, 6th Ed., Prentice Hall, 2005.
- 5) CLAYDEN, J.; GREEVES, N.; WARREN, S. *Organic Chemistry*, 2a Ed., Oxford University Press, USA 2012.