

Código: <b>Q0858</b>								
Nome: <b>Introdução à Físico-Química Orgânica</b>								
Nome em Inglês: <b>Introduction to Physical Organic Chemistry</b>								
Nome em Espanhol: <b>Introducción a la Físico-Química Orgánica</b>								
Tipo de Disciplina: <b>Semanal</b>								
Tipo de Aprovação: <b>Nota e Frequência</b>								
Característica: <b>Regular</b>								
Frequência: <b>75%</b>								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: <b>Semestral / A critério da Unidade de Ensino</b>								
Exige Exame: <b>Sim</b>								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
<b>2</b>	-	-	-	-	-	<b>2</b>	<b>15</b>	<b>2</b>
Ocorrência nos Currículos:								
Pré-requisitos: <b>Q0521 ou Q0323 ou Q0427 ou Q0421</b>								
<p><b>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.</b></p>								
<p>Programa:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Estrutura e modelos de ligação química</li> <li>2. Termodinâmica e estabilidade de compostos orgânicos <ol style="list-style-type: none"> <li>a) Entalpia, entropia e energia livre de Gibbs</li> <li>b) Termodinâmica de compostos orgânicos estáveis e intermediários reativos</li> </ol> </li> <li>3. Análise conformacional <ol style="list-style-type: none"> <li>a) Efeitos estéricos e eletrostáticos e estereoelétrônicos</li> <li>b) Métodos espectroscópicos em análise conformacional</li> </ol> </li> <li>4. Superfícies de energia potencial e análise cinética de reações orgânicas <ol style="list-style-type: none"> <li>a) Teoria do estado de transição</li> <li>b) Postulados e princípios relacionados com cinética de reações</li> <li>c) Análise de cinética para mecanismos simples</li> </ol> </li> <li>5. Ferramentas relacionadas aos estudos de mecanismos de reação <ol style="list-style-type: none"> <li>a) Efeitos isotópicos cinéticos</li> <li>b) Relações lineares de energia livre</li> </ol> </li> </ol>								

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.