



**unioeste**

Universidade Estadual do Oeste do Paraná

Campus de Toledo

Rua da Faculdade, 645 - Jd. Santa Maria - Fone: (45) 3379-7060 - CEP 85903-000 - Toledo - PR

Email: toledo.mestradoquimica@unioeste.br



1

## Anexo II – Resolução nº 133/2003-CEPE

### UNIVERSIDADE ESTADUAL DO OESTE DO PARANÁ PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO

**PLANO DE ENSINO - PERÍODO LETIVO/ANO - 1º/2022**

**Programa: Programa de Pós-Graduação em Química - PPGQUI**

**Área de Concentração: Química**

**Mestrado em Química**

**Centro das Engenharias e Ciências Exatas - CECE**

**Campus de Toledo**

#### DISCIPLINA

Código	Nome	Carga horária		
		AT <sup>1</sup>	AP <sup>2</sup>	Total
	Química Orgânica Avançada	60		60

<sup>1</sup> Aula Teórica; <sup>2</sup> Aula Prática)

#### Ementa

Métodos de determinação dos mecanismos de reações. Aspectos termodinâmicos e cinéticos. Reatividade e estrutura. Substituição nucleofílica alifática: S<sub>N</sub>2 e S<sub>N</sub>1, par iônico e participação do grupo vizinho. Reações de eliminação: E1, E2 e E1cB. Reatividade e efeitos de orientação. Stereoquímica. Reações de adições polares: alcenos e alcinos. Carbânions e outras espécies nucleofílicas de carbono. Aromaticidade: mecanismos das reações de substituição eletrofílica e nucleofílica aromática, orientação e reatividade. Reações de compostos carbonílicos. Reações de cicloadição: reações de Diels-Alder, reações de cicloadição 1,3-dipolar. Reações radiculares.

#### Objetivos

**Objetivo Geral:** aluno deverá ser capaz de, no final do curso, aplicar os fundamentos teóricos na dedução das propriedades e reatividade dos compostos, discutindo reações e mecanismos básicos em química orgânica.

**Objetivos Específicos:** Na medida em que o aluno receba os conteúdos programáticos, resolva os exercícios e execute as tarefas de leitura e de estudos, deverá ser capaz de:

1. Aplicar os fundamentos teóricos e a teoria estrutural ao estudo das reações e dos mecanismos;
2. Reconhecer as propriedades dos compostos;
3. Relacionar as propriedades dos compostos às reações características;
4. Aplicar os conhecimentos teóricos básicos na análise e discussão dos mecanismos (gerais) das reações;
5. Criticar artigos científicos da literatura corrente relacionados com o conteúdo programático da disciplina.



**unioeste**

Universidade Estadual do Oeste do Paraná  
Campus de Toledo

Rua da Faculdade, 645 - Jd. Santa Maria - Fone: (45) 3379-7060 - CEP 85903-000 - Toledo - PR  
Email: toledo.mestradoquimica@unioeste.br



2

## Conteúdo Programático

### 1. Fundamentos de Química Orgânica:

1.1 Teoria de orbitais moleculares: orbitais híbridos, ligações pideslocalizadas, aromaticidade, método da combinação linear de orbitais atômicos, orbitais de fronteira (HOMO-LUMO).

1.2 Estudo e Descrição de Mecanismos de Reações Orgânicas: Parâmetros termodinâmicos e cinéticos para as reações. Aproximação do estado estacionário, teoria do estado de transição, princípio da reversibilidade microscópica, velocidade de reação vs. temperatura, efeitos do substituinte e relações lineares de energia livre, controle cinético vs. termodinâmico, postulado de Hammond, princípio de Curtin-Hammett, efeito isotópico, identificação de produtos e intermediários, catálise por ácido ou base.

1.3 Ácidos e Bases: Teoria de Bronsted; ácidos e bases de Lewis, ácidos e bases duros e moles, efeitos da estrutura e do meio sobre a força de ácidos e bases; escalas de acidez.

1.4 Estereoquímica: relações enantioméricas e diastereoméricas, relações pró-quirais; resolução enantiomérica.

### 2. Reações dos compostos carbonílicos:

2.1 Padrões mecanísticos das reações de adição e substituição à centros carbonílicos.

### 3. Substituição Nucleofílica:

3.1 Substituição nucleofílica pelo mecanismo de ionização ( $S_N1$ )

3.2 Substituição nucleofílica pelo mecanismo de deslocamento direto ( $S_N2$ )

3.3 Relação entre estereoquímica e os mecanismos de substituição

3.4 Efeitos de solvatação e estrutura na reatividade

3.4.1 Características de nucleofilicidade, efeitos de solvatação na nucleofilicidade, efeitos do grupo de saída, efeitos da conjugação na reatividade

3.5 Participação do grupo vizinho

3.6 Estrutura e reações de intermediários carbocátions

3.7 Reação de Mitsunobu

### 4. Reações de Eliminação

4.1 Mecanismos de E1, E2 e E1cb

4.2 Regioquímica das eliminações

4.3 Estereoquímica das reações E2

4.4 Desidratação de álcoois

### 5. Adições eletrofilicas à ligação múltipla C-C

5.1 Adições eletrofilicas à alcenos: adição de HX, adição de halogênios, hidratação, sulfenilação e selenilação, hidroboração.

5.2 Ciclização eletrofilica: halociclização, ciclização com espécies eletrofilicas de enxofre e selênio, Regras de Baldwin.

### 6. Reações de Substituição Aromática

6.1 Critérios de aromaticidade

6.2 Reações de Substituição eletrofilica aromática: nitração, halogenação, alquilação e acilação de Friedel-Crafts, Metalação eletrofilica

6.3 Relação estrutura x reatividade de benzenos substituídos





**unioeste**

Universidade Estadual do Oeste do Paraná  
Campus de Toledo

Rua da Faculdade, 645 - Jd. Santa Maria - Fone: (45) 3379-7060 - CEP 85903-000 - Toledo - PR

Email: toledo.mestradoquimica@unioeste.br



3

**6.4** Reações de substituição nucleofílica aromática: íons arildiazônio como intermediários sintéticos, substituição pelo mecanismo de adição-eliminação, substituição pelo mecanismo de eliminação-adição.

**6.5** Reações de substituição aromática catalisadas por metais de transição: reações catalisadas por cobre, reações catalisadas por Paládio.

**7.** Reações de radicais

**7.1** Formação de radicais e detecção de radicais

**7.2** Reações de radicais: adições, substituições, mecanismo  $S_{NR}1$ , substituição aromática.

**8.** Reações pericíclicas: reações eletrocíclicas, reações sigmatrópicas e reações de cicloadição (Diels-Alder)

**8.1** Esterioquímica de reações pericíclicas: processos conrotatórios e disrotatórios, suprafaciais e antarafaciais

**8.2** Regras de Woodward-Hoffmann e de orbitais de fronteira (Fukui);

**8.3** Reações de cicloadição 1,3-dipolar

### Metodologia

Considerando a Ordem de Serviço nº 005/2022-GRE que dispõe sobre o retorno das aulas presenciais nos cursos de pós-graduação *latu sensu* e *strict sensu* da Unioeste, a metodologia adotada será baseada em aulas teóricas expositivas, utilizando recursos audiovisuais existentes na instituição, tais como projetor multimídia, quadro-negro, giz e apagador. Serão propostos estudos de caso utilizando-se artigos relevantes da área.

### Avaliação

(critérios, mecanismos, instrumentos e periodicidade)

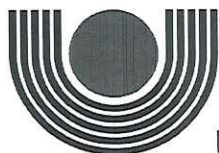
A avaliação consistirá da média de quatro provas abrangendo os conteúdos abordados, com peso (6) e um seminário em formato de aula com peso (4).

A média final será calculada pela seguinte expressão:

$$MF = M(P)*0,6 + M(S)*0,4$$

### Bibliografia básica

- CAREY, F.**, "Organic Chemistry", 5ª edição, McGrawHill. New York, EEUU, 1997.
- MARCH, J.** Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure. 6th ed. New York: John Wiley, 2007.
- ANSLYN, E. V.; DOUGHERTY, D. A.** Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books, 2006.



**unioeste**

Universidade Estadual do Oeste do Paraná

Campus de Toledo

Rua da Faculdade, 645 - Jd. Santa Maria - Fone: (45) 3379-7060 - CEP 85903-000 - Toledo - PR

Email: toledo.mestradoquimica@unioeste.br



4

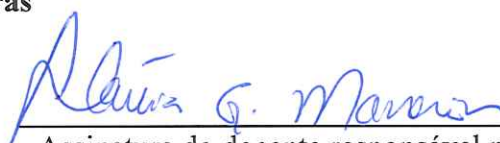
### Bibliografia complementar

1. **LOWRY, T. H.; RICHARDSON, K. S.** Mechanism and Theory in Organic Chemistry. 3rd ed. New York: Harper and Row, 1987.
2. **MASKILL, H.** Mechanisms of Organic Reactions. New York: Oxford University Press, 2000.
3. **MASKILL, H.** Structure and Reactivity in Organic Chemistry. New York: Oxford University Press, 2000.
4. **KIRBY, A. J.** Stereoelectronic Effects. New York: Oxford University Press, 2000.

### Docentes

**Flávia Giovana Manarin – 15 horas**  
**Isaq George Rosset – 15 horas**  
**Maurício Ferreira da Rosa – 15 horas**  
**Renato Eising – 15 horas**

**Data:** /02/2022



Assinatura do docente responsável pela disciplina

### Colegiado do Programa (aprovação)

Ata n° 001, de 11 / 02 /2022.

**Coordenador: Cleber Antonio Lindino**



Assinatura  
**Prof. Dr. Cleber Antonio Lindino**  
Coordenador Especial do Programa de  
Pós-Graduação Em Química Mestrado  
Portaria N° 0350/2021-GRE

### Conselho de Centro (homologação)

Ata de n° 01, de 07/03 /2022.

**Diretor de Centro: Élvio Antônio de Campos**



Assinatura  
**Élvio Antônio de Campos**  
Diretor do Centro de Engenharias  
& Ciências Exatas  
Portaria n° 0027/2020-GRE  
Unioeste - Campus de Toledo

Encaminhada cópia à Secretaria Acadêmica em: / / .

Nome/assinatura