

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/2021

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

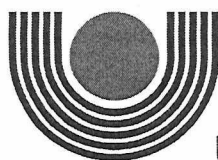
DISCIPLINA

Código	Nome	Carga horária		
		AT ¹	AP ²	Total
	Química Orgânica Avançada	60		60

(¹ Aula Teórica, ² Aula Prática)

Ementa

Métodos de determinação dos mecanismos de reações. Aspectos termodinâmicos e cinéticos. Reatividade e estrutura. Substituição nucleofílica alifática: S_N2 e S_N1, par iônico e participação do grupo vizinho. Reações de eliminação: E1, E2 e E1cB. Reatividade e efeitos de orientação. Estereoquímica. 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 radicalares.



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



PARANÁ

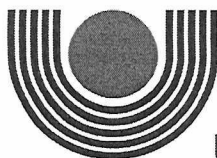
GOVERNO DO ESTADO

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



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 eletrofílicas à ligação múltipla C-C

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

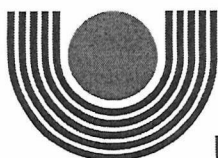
5.2 Ciclização eletrofílica: halociclização, ciclização com espécies eletrofílicas de enxofre e selênio, Regras de Baldwin.

6. Reações de Substituição Aromática

6.1 Critérios de aromaticidade

6.2 Reações de Substituição eletrofílica aromática: nitração, halogenação, alquilação e acilação de Friedel-Crafts, Metalacçãoeletrofílica

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



PARANÁ
GOVERNO DO ESTADO

4

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 Estereoquímica 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

Atividades Práticas – grupos de alunos

Metodologia

Devido à pandemia do COVID-19 e considerando a Resolução nº 052/2020 – CEPE, a metodologia adotada excepcionalmente abrangerá o envio de materiais de apoio. Aulas remotas síncronas realizadas por meio de aplicativos como *Google Meet* ou *Microsoft Teams* serão realizadas para discussão dos temas. Tarefas sobre os temas serão solicitadas, avaliadas e o docente dará *feedback* aos discentes. Recursos como textos e temas de caráter científico em artigos científicos serão utilizados. Caso as aulas voltem a ser presenciais, serão utilizadas aulas expositivas incentivando a participação e valorizando os conhecimentos prévios dos acadêmicos. Estudos de caso utilizando artigos relevantes da área.

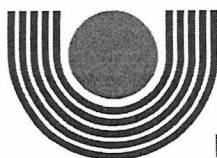
Avaliação

(critérios, mecanismos, instrumentos e periodicidade)

A avaliação consistirá da média de duas 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:

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



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



PARANÁ
GOVERNO DO ESTADO

5

Bibliografia básica

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

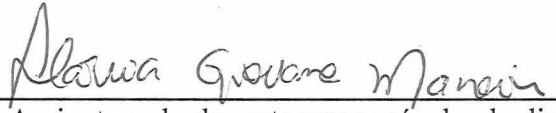
Bibliografia complementar

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

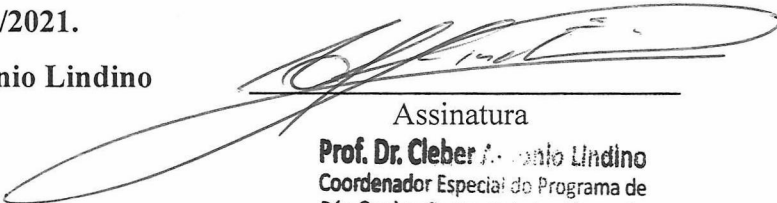
Data: 05/04/2021


Assinatura do docente responsável pela disciplina

Colegiado do Programa (aprovação)

Ata nº 002, de 05/04/2021.

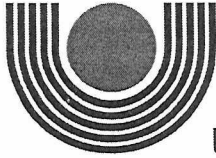
Coordenador: Cleber Antonio Lindino



Assinatura

Prof. Dr. Cleber Antonio Lindino
Coordenador Especial do Programa de
Pós-Graduação Em Química Mestrado

Portaria N° 0256/2021-GRE



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



PARANÁ
GOVERNO DO ESTADO

6

Conselho de Centro (homologação)

Ata de nº 02, de 12/04/2021.

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

Assinatura

Élvio Antônio de Campos
Diretor do Centro de Engenharias
e Ciências Exatas
Portaria nº 6327/2020-GRE
Unioeste - Campus de Toledo

Encaminhada cópia à Secretaria Acadêmica em: / / .

Nome/assinatura