



**PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS**

<b>Disciplina</b>	
<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QO427	Química Orgânica I

<b>Vetor</b>
OF:S-2 T:004 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:004 SL:004 C:004 AV:N EX:S FM:75%

<b>Pré-Req</b>	QG101
----------------	-------

<b>Ementa</b>
Orbitais híbridos, Hidrocarbonetos. Petróleo. Benzeno e derivados. Haletos orgânicos. Alcoois. Éteres. Ácidos carboxílicos e derivados. Aldeídos e cetonas. Aminas. Compostos heterocíclicos. Polímeros. Noções de Estereoquímica.

<b>Programa</b>
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Introdução à disciplina: Química orgânica como ciência, alguns aspectos históricos e de teoria estrutural.</li><li>2. Estrutura Eletrônica e Ligação Química:<ol style="list-style-type: none"><li>a) Teoria estrutural da química orgânica;</li><li>b) Ligações químicas, regra do octeto;</li><li>c) Estruturas de Lewis, carga formal;</li><li>d) Estruturas de Ressonância;</li><li>e) Orbitais Atômicos e orbitais moleculares; f) Orbitais Híbridos e suas ligações;</li><li>g) Geometria molecular.</li></ol></li><li>3. Compostos orgânicos<ol style="list-style-type: none"><li>a) Grupos funcionais;</li><li>b) Ligações químicas: ligações covalentes apolares e polares, eletronegatividades, dipolos; interações intermoleculares.</li></ol></li><li>4. Introdução às reações orgânicas. Acidez e basicidade<ol style="list-style-type: none"><li>a) Exemplos de uma reação orgânica, equilíbrios.</li><li>b) Reações ácido-base, ácidos e bases de Bronsted e de Lewis;</li></ol></li></ol>

- c) A força de ácidos e bases,  $K_a$  e  $pK_a$ ;
- 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;
- f) Projeções de Fischer;
- g) Estereoquímica em sistemas cíclicos;
- h) Faces pró-quirais: face  $R_e$  e face  $S_i$ ;
- i) 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), íldeos 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-Kischner.
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**

F. A. Bettelheim, W. H. Brown, J. March, "Introduction to General, Organic & Biochemistry", Harcourt College Publishers, 6th ed., 2001, Philadelphia.  
R.C. Atkins and F.A. Carey, "Organic Chemistry - A Brief Course", 1990, McGraw-Hill Public. Co.  
L. C. de A. Barbosa "Introdução à Química Orgânica", Ed. UFV., Pearson Prentice Hall, 2004.  
J. McMurry, "Química Orgânica", Thomson Learning Ltda., 6a. Ed., 2005.  
Bruice, P. Y., "Química Orgânica", Pearson Prentice Hall, S. Paulo, 4a. Ed., 2006.  
T. W. G. Solomons, Química Orgânica, Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 1983.  
Outros autores: Morrison & Boyd; C. Heathcock e N. Allinger, entre outros.

#### **Critérios de Avaliação**

Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação.  
Frequência: 75 % (\* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)