

IQU-706 Química Orgânica Avançada (60 horas)

Ementa:

1) Orbitais moleculares de Huckel, cálculo de coeficientes e cargas; reações de cicloadição, rearranjo sigmatrópico, reações eletrocíclicas e interações secundárias; 2) Acidez e basicidade: Hammett e suas aplicações; sigmas (+, I e R); afinidade protônica, acidez em fase gasosa, dureza e moleza; efeito cinético isotópico; 3) radicais livres: teoria de Marcus, abstração de H, polimerização, rearranjos.

Bibliografia:

1. F. A. Carey and R. J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry*, Vol. A, 4th Ed., Springer, NY, 818pp., 2004.
2. Jerry March and M. B. Smith, *Advanced Organic Chemistry*, 5rd Ed., Wiley, NY, 1377pp., 2001.
3. Peter Sykes, *A Guidebook to Mechanism in Organic Chemistry*, 6th Ed., Prentice Hall, NY, 432pp., 1986.
4. Addy Pross, *Theoretical and Physical Principles of Organic Reactivity*, Wiley, NY, 312pp., 1995.
5. Neil Isaacs, *Physical Organic Chemistry*, 2nd Ed., Longman, UK, 411pp., 1995.
6. Ian Fleming, *Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions*, John Wiley & Sons, NY, 243pp., 1976.
7. Bernard Miller, *Advanced Organic Chemistry: Reactions and Mechanisms*, 2nd Ed, Prentice Hall, London, 2002.
8. Dennis A. Dougherty, Eric V. Anslyn, *Modern Physical Organic Chemistry*, University Science Books, NY, 2006.
9. Artigos de periódicos especializados como J. Am. Chem. Soc., J. Org. Chem. e J. Phys. Chem.