

## IQU-711 Mecanismos de Reações Orgânicas (60 horas)

### Ementa:

Conceitos fundamentais usados em mecanismos. Classificações de mecanismos. Metodologia para obter informação para eliminar propostas de mecanismo, incluindo métodos cinéticos gerais, aplicação da equação de Hammett, efeitos cinéticos de isótopos, Parâmetros de Nucleofilicidade e Efeito de Solvente. Substituição Nucleofílica nos carbonos saturados: história das classificações; resultados que delimitam a utilização de modelos específicos; participação do grupo vizinho via elétrons  $n$ ,  $\pi$  e  $\sigma$  tanto nos estados de transição quanto intermediários. Mecanismos de Substituição Eletrofílica e Nucleofílica Aromática. Mecanismos de adição às ligações  $\pi$  e mecanismos de eliminação. Catalise Ácido Geral como critério mecanístico aplicados nas adições a sistemas  $\pi$ . Reações por transferência de elétrons para gerar, anions radicais, e cátion radicais. Mecanismos envolvendo radicais livres.

### Bibliografia:

1. F. A. Carey and R. J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry*, Vol. A, 4th Ed., Kluwer Academic/Plenum Publishers, 883 pp., 2000.
2. Jerry March, *Advanced Organic Chemistry*, 3rd Ed., Wiley, NY, 1346pp., 1985.
3. N. Isaacs, *Physical Organic Chemistry*, 2nd Ed., Longman Group Limited, 877 pp., 1995.
4. R. B. Grossman, *The Art of Writing Reasonable Organic Reaction Mechanisms*, Springer-Verlag, New York, Inc, 331pp., 1998.
5. Literatura de revistas científicas especializadas como: *Journal of the American Chemical Society*, *Journal of Organic Chemistry*, *Accounts of Chemical Research*, *Chemical Reviews*.