

IQU-807 Físico-Química Orgânica (60 horas)

Ementa:

Princípios de Reatividade Modelos de Ligação Química; Introdução à cinética química e termodinâmica. Reagentes e mecanismos de reação. Correlação de Estrutura com Reatividade e Propriedades. Bases empíricas. Métodos experimentais e tratamento de dados. Teorias do estado de transição. Efeitos de substituintes nos estados de transição. Efeitos do meio. Efeitos de Solvente. Estrutura e ordem em solventes. Ligação hidrogênio. Ligação hidrofóbica. Reações em solução. Reações complexas. Ácidos e bases, eletrófilos e nucleófilos. Efeitos isotópicos na cinética. Propriedades estéricas e conformacionais. Catálise. Reações de Substituição no carbono. Reações de Eliminação. Reações de Adição polar. Reações intramoleculares. Reações *via* Radicais livres. Fotoquímica Orgânica. Detecção e estudo de Intermediários Reativos.

Bibliografia:

1. N. Isaacs, Physical Organic Chemistry, 2^o Ed., Longman., UK, 877pp., 1995.
2. T. H. Lowry, K. S. Richardson, Mechanism and Theory in Organic Chemistry, 3^o Ed.; Harper&Row, NY, 1090pp., 1987.
3. B. K. Carpenter, Determination of Reaction Mechanisms, Wiley, NY, 247pp., 1984.
4. J. H. Murrell and E. A. Boucher, Properties of liquids and solutions, J. Wiley & Sons, Chichester, 1982.
5. C. Reichardt, Solvents and solvent effects in organic chemistry, 3rd Ed., VCH, Weinheim, 653pp., 2003.
6. A. Pross, Theoretical and Physical Principles of Organic Reactivity, Wiley-Interscience, New York, 1995.
7. S. S. Shaik, H. B. Schlegel e S. Wolfe Theoretical Aspects of Physical Organic Chemistry. The SN2 Mechanism, Wiley-Interscience, NY, 1992.
8. L. Ebersson, Electron Transfer Reactions in Organic Chemistry, Springer-Verlag, Berlin, 1987.
9. E. V. Anslyn, D. A. Dougherty, Modern Physical Organic Chemistry, University Science, NY, 1104pp., 2005.
10. Artigos científicos de periódicos como Journal of the American Chemical Society; Journal of Organic Chemistry; Chemical Review; Accounts Chemical Research; Journal of Physical Chemistry. Physical Organic Chemistry.