

QMC 924 - Orbitais Moleculares em Reações Orgânicas Clássicas

[45 horas/03 créditos]

Ementa da Disciplina

Orbital Molecular e Orbital de Fronteira. Teoria da Perturbação e Estado de Transição Reatividade Química. Reações Iônicas Princípio de ácido e base duro e mole Eletrófilos e Nucleófilos duro e mole. Nucleófilos Ambidentados: Nucleófilos carregados, Substituição Eletrofilica Aromática, Benzeno C-; X e Z substituído. Eletrófilos Ambidentados: Eletrófilos Aromáticos, Alifáticos. Controle Estereoelétrônico em Reações Orgânicas. Energia e coeficientes de OF. Reações de Ciclo Adição. Rearranjos Moleculares. Exercícios.

Programa Detalhado:

- I. Orbital Molecular e Orbital de Fronteira
- II. Teoria da Perturbação e Estado de Transição
- III. Reações Iônicas
- IV. Princípio de ácido e base duro e mole
- V. Nucleófilos Ambidentados: Nucleófilos carregados
- VI. Substituição Eletrofilica Aromática : Benzeno C-; X e Z substituído.
- VII. Eletrófilos Ambidentados:
- VIII. Eletrófilos Aromáticos, Alifáticos.
- IX. Controle Estereoelétrônico em Reações Orgânicas.
- X. Energia e coeficientes de OF
- XI. Reações de Ciclo Adição
- XII. Rearranjos Moleculares
- XIII. Exercícios.

LITERATURA:

1. F.A. Carey, R.J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry*. Part A: *Structure and Mechanism*; Part B: *Reactions and Synthesis*. 3rd. Edition, Plenum Press, New York, 1990.
2. Woodward-Hoffmann Theory - Chapter 4
Thermal Pericyclic Reactions. R. B. Woodward and R. Hoffmann, *The Conservation of Orbital Symmetry*, Verlag Chemie, Weinheim, 1970.
3. Frontier Molecular Orbital Theory: I. Fleming, *Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions*, John-Wiley and Sons, New York, 1976.
4. Dewar-Zimmerman Theory: T. H. Lowry and K. S. Richardson, *Mechanism and Theory in Organic Chemistry*, 3rd Ed., Harper & Row, New York, 1987.
5. R. E. Lehr and A. P. Marchand, *Orbital Symmetry: A Problem Solving Approach*, Academic Press, New York, 1972.
6. Artigos e Revisões da Literatura atual.