



Informações da disciplina

Disciplina: QUI022 - Química Orgânica

Créditos: 64 horas

Sala: B4211

Dia/hora: TER/QUA, 19:00 – 20:40

Pré-requisitos: Química Geral (EMT102 ou QUI016)

Informações do professor

Nome: Lucas Raposo Carvalho

Sala: Sala C2248, Instituto de Física e Química, 2º andar.

E-mail: lucasraposo@unifei.edu.br

Horário de atendimento: TER/QUI, 14:00 – 16:00.

1 Breve descrição da disciplina

Pretende-se preparar os alunos dos cursos de Engenharia Química e Engenharia de Materiais em tópicos centrais de Química Orgânica que serão úteis em situações acadêmicas e profissionais futuras. Em específico, a ementa da disciplina tem, como foco, conceitos abordados em Química de Polímeros. Especificamente, serão abordados fundamentos teóricos relacionados a estabilização e reatividade de espécies orgânicas, grupos funcionais e nomenclatura, propriedades físico-químicas e reações de formação de polímeros – *e.g.*, (i) radicalares, (ii) adição à ligação C=C, (iii) adição e substituição na ligação C=O, (iv) substituição aromática e (v) abertura de epóxidos).

2 Objetivos da disciplina

Ao final da disciplina, espera-se que o aluno possua as seguintes habilidades/competências:

- Identificar ligações químicas correspondentes a orbitais sp^3 , sp^2 e sp ;
- Identificar e explicar efeitos indutivos (hiperconjugativos) e de ressonância (deslocalização) em moléculas orgânicas;
- Identificar grupos funcionais mais comuns e como são identificados por FTIR;

- Identificar e prever tendências de propriedades como temperatura de fusão/ebulição e solubilidade com base em estruturas químicas;
- Utilizar tabelas de pK_a para determinar o curso de reações ácido-base;
- Representar moléculas em diferentes projeções, identificar diastereoisômeros e enantiômeros, e fornecer a nomenclatura de compostos com estereoquímica absoluta;
- Identificar reações radicalares, seus principais substratos e iniciadores, suas etapas mecanísticas e fatores que afetam a reatividade de compostos, além de identificar os principais polímeros feitos por poliadicação;
- Justificar e prever reações em carbonilas, identificar e manipular os principais mecanismos de adição e substituição em carbonilas e identificar os principais polímeros de policondensação;
- Justificar e prever reações a partir de compostos aromáticos, sua regioseletividade e saber exemplos representativos de reações que ocorrem em polímeros;
- Identificar as condições ideais para os diferentes tipos de abertura de epóxido e determinar como podem ser aplicadas na indústria de resinas e outros polímeros correlatos.

3 Formas de avaliação

Os alunos serão avaliados por provas (3×25 pontos), testes (3×5 pontos) e listas (3, totalizando 10 pontos).

1. As provas (P1, P2 e P3) terão conteúdo *cumulativo*, conforme mostra o calendário;
2. Os testes (T1, T2 e T3) terão conteúdo *único*, demonstrado na seção seguinte, deverão ser feitos em casa e entregues até a data estipulada na seção seguinte.
3. Cada lista (L1, L2 e L3) será referente à respectiva prova e deverá ser entregue até o *dia útil anterior* à aplicação dessa.

4 Datas importantes

Teste 1 (Módulo 2) - Data limite	02/09/2024
Teste 2 (Módulo 8) - Data limite	14/10/2024
Teste 3 (Módulo 10) - Data limite	18/11/2024
Prova 1 (Módulos 1 a 5)	17/09/2024
Prova 2 (Módulos 1 a 9)	30/10/2024
Prova 3 (Módulos 1 a 12)	04/12/2024
Prova substitutiva	11/12/2024

5 Calendário

TERÇA-FEIRA		QUARTA-FEIRA	
Data: 13/8	1	Data: 14/8	2
Ementa, datas e informações		1. Representação e Teoria de Ligação	
Data: 20/8	3	Data: 21/8	4
1. Teoria de Ligação (Hibridação)		2. Efeito indutivo e mesomérico	
Data: 27/8	5	Data: 28/8	6
2. Efeito indutivo e mesomérico		2. Efeito indutivo e mesomérico	
Data: 3/9	7	Data: 4/9	8
3. Grupos funcionais		3. Grupos funcionais (Espectroscopia na região do Infravermelho)	
Data: 10/9	9	Data: 11/9	10
4. Nomenclatura		5. Propriedades físicas e químicas de compostos orgânicos	
Data: 17/9	11	Data: 18/9	12
P1: Módulos 1 a 5		6. Acidez e basicidade	

TERÇA-FEIRA		QUARTA-FEIRA	
Data: 24/9	13	Data: 25/9	14
6. Acidez e basicidade		7. Estereoquímica	
Data: 1/10	15	Data: 2/10	16
8. Reações radicalares		8. Reações radicalares	
Data: 8/10		Data: 9/10	
Recesso escolar		Recesso escolar	
Data: 15/10	17	Data: 16/10	18
9. Reações de adição à ligação C=C		9. Reações de adição à ligação C=C	
Data: 22/10	19	Data: 23/10	20
9. Reações de adição à ligação C=C		9. Reações de adição à ligação C=C (Abertura de epóxidos)	
Data: 29/10	21	Data: 30/10	22
Aula de exercícios (P2)		P2: Módulos 1 a 9	
Data: 5/11	23	Data: 6/11	24
10. Reações de substituição aromática		10. Reações de substituição aromática	
Data: 12/11	25	Data: 13/11	26
10. Reações de substituição aromática		10. Reações de substituição aromática	
Data: 19/11	27	Data: 20/11	
11. Reações de adição à ligação C=O		Dia Nacional de Zumbi e da Consciência Negra	

TERÇA-FEIRA	QUARTA-FEIRA
Data: 26/11 28 11. Reações de adição à ligação C=O	Data: 27/11 29 11. Reações de adição à ligação C=O
Data: 3/12 30 Aula de exercícios (P3)	Data: 4/12 31 P3: Módulos 1 a 12
Data: 10/12 32	Data: 11/12 33 Prova substitutiva

6 Ementa

6.1 Módulo 1. Representação e Teoria de Ligação

Tópico majoritariamente de **revisão**, abordando conceitos já vistos em Química Geral. Tópicos discutidos incluem formas de representação de moléculas orgânicas (Lewis, Kekulé e linha-ângulo), revisão de estrutura atômica, ligação química e teoria de Lewis. O módulo também inclui uma discussão sobre hibridação, sendo o tópico principal.

Tópico principal	Duração pretendida
Hibridação (sp , sp^2 e sp^3) e orbitais moleculares σ e π	Duas aulas

6.2 Módulo 2. Efeito indutivo e mesomérico

Tópico majoritariamente **novo**. Porém, será aprofundado nas sessões que forem úteis para os módulos seguintes. Tópicos discutidos incluem a discussão sobre o efeito indutivo – *i.e.*, hiperconjugação –, e o mesomérico (ressonância) – *i.e.*, deslocalização eletrônica por conjugação – e seus aspectos químicos para estabilização de substâncias. Serão abordados casos de estabilização de espécies carbônicas catiônicas – *i.e.*, carbocátions –, aniônicas – *i.e.*, carbânions – e radicalares.

Tópico principal	Duração pretendida
Fatores para estabilização de espécies carregadas e radicalares	Três aulas

6.3 Módulo 3. Grupos funcionais

Tópico **novo**. Porém, será apresentando com caráter majoritariamente expositivo. As funções orgânicas abordadas de forma aprofundada são as mais importantes para os módulos seguintes. As outras serão apresentadas em um documentos disponibilizado no SIGAA. Também será mostrado fundamentos básicos da Espectroscopia na Região do Infravermelho (FTIR), discutindo-se a análise de espectros contendo as funções discutidas em sala.

Tópico principal	Duração pretendida
Identificação de funções orgânicas e conceitos básicos de FTIR	Duas aulas

6.4 Módulo 4. Nomenclatura

Tópico parcialmente **novo**. Será abordada a nomenclatura de compostos orgânicos de forma resumida, apresentando informações sobre cadeias principais (prefixos), substituintes, ramificações e como as funções orgânicas abordadas no Módulo 3 são nomeadas.

Tópico principal	Duração pretendida
Nomenclatura a partir de cadeias principais e substituintes	Uma aula

6.5 Módulo 5. Propriedades físicas e químicas de compostos orgânicos

Tópico parcialmente **novo**. O conceito de interações intermoleculares será rapidamente revisado, seguido da discussão de tópicos como ponto de ebulição e solubilidade e como as interações mencionadas são capazes de justificar tendências de tais propriedades.

Tópico principal	Duração pretendida
Análise estrutural de propriedades físico-químicas	Uma aula

6.6 Módulo 6. Acidez e basicidade

Tópico parcialmente **novo**. O conceito da constante de equilíbrio – *i.e.*, K_a – e seu p-valor – *i.e.*, pK_a – serão rapidamente revisados. Em seguida, será discutido como a tabela de K_a e pK_a podem ser utilizadas para prever a reatividade de compostos orgânicos.

Tópico principal	Duração pretendida
Uso de K_a e pK_a para análise de reatividade	Duas aulas

6.7 Módulo 7. Estereoquímica

Tópico **novo**. Dentre os diversos assuntos, serão abordados carbociclos com até seis carbonos (cicloexano), tensões angular e torsional, conceito de quiralidade e nomenclatura Cahn-Ingold-Prelog.

Tópico principal	Duração pretendida
Racionalização do cicloexano e nomenclatura	Uma aula

6.8 Módulo 8. Reações radicalares

Tópico **novo**. Será abordado aspectos principais de reações radicalares, como (i) radicais e suas tendências de estabilidade, (ii) mecanismo geral e (iii) principais iniciadores.

Tópico principal	Duração pretendida
Estabilidade, mecanismo e reagentes em reações radicalares	Duas aulas

6.9 Módulo 9. Reações de adição à ligação C=C

Tópico **novo**. Serão discutidos aspectos de reatividade de ligações C=C, aspectos principais do mecanismo e exemplos representativos, envolvendo adição de HX e epoxidação. Também será abordada a abertura de epóxidos em diferentes condições

Tópico principal	Duração pretendida
Mecanismos, exemplos de reações C=C e epóxidos	Três aulas

6.10 Módulo 10. Reações de substituição aromática

Tópico **novo**. Serão discutidos aspectos de reatividade de compostos benzênicos e de outros ciclos aromáticos. Também serão discutidos os aspectos principais das reações de S_EAr . Serão discutidos os exemplos principais da substituição eletrofílica, sendo a nitração, sulfonação, halogenação e reações de Friedel-Crafts. Por fim, serão discutidos efeitos diretores.

Tópico principal	Duração pretendida
Mecanismos, reagentes e reatividade de S_EAr	Quatro aulas

6.11 Módulo 11. Reações de adição à ligação C=O

Tópico **novo**. Serão discutidos aspectos de reatividade de carbonilas de aldeídos/cetonas, ácidos carboxílicos e derivados. Também serão discutidos os mecanismos principais de adição e adição/eliminação (substituição). Finalmente, serão abordados exemplos representativos envolvendo amidação, esterificação, formação de policarbonatos e reações com isocianatos.

Tópico principal	Duração pretendida
Mecanismos, reagentes e reatividade em adições à C=O	Três aulas

7 Recursos interessantes

Alguns recursos podem ajudar os alunos no decorrer da presente disciplina e em outras situações. Dentre eles, destacam-se:

1. **Enciclopédias/compilados:** O *CRC Handbook of Chemistry and Physics* e a *Ullman's Encyclopedia of Industrial Chemistry* são livros que contém propriedades físicas e químicas de elementos e compostos, além de formas comuns de obtenção.
2. **Serviços de indexação de moléculas:** Estruturas moleculares podem ser buscadas utilizando o SciFinderⁿ, fornecido pela American Chemical Society (ACS), e o Reaxys, fornecido pela Elsevier, são serviços on-line de indexação de substâncias químicas, possibilitando a busca de documentos que contenham certas estruturas.
3. **Bases de dados patentárias e não-patentárias:** Bases de dados como o EspaceNet, fornecido pelo Escritório Europeu de Patentes (EPO), e o Google Patents, fornecido pela Google, contém documentos patentários que podem ser acessados mediante busca. Da mesma forma, plataformas como o Google Scholar, fornecido pela Google, e a Biblioteca Digital Brasileira de Dissertações e Teses (BDTD), fornecida pelo IBICT, contém literatura não-patentária.
4. **Periódicos úteis para as áreas de engenharia:** Os periódicos *Organic Syntheses* e o *Organic Process Research & Development*, mantido pela ACS, contém informações sobre sínteses orgânicas previamente testadas e pesquisas de interesse industrial, respectivamente.

5. Bases de dados com informações químicas:

- Mayr's Database of Reactivity Parameters: mostra parâmetros de reatividade de compostos orgânicos de forma organizada e direta;
- Spectral Database for Organic Compounds: mostra dados espectrais experimentais para vários compostos orgânicos;
- Bordwell pK_a table: mostra valores compilados de pK_a para vários compostos orgânicos;
- NIST Chemistry WebBook: serviço mantido pelo National Institute of Standards and Technology (EUA) que contém vários dados físico-químicos de compostos.