



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO

Via Washington Luís, Km 235 - Caixa Postal 676

Fones: (16) 3351-8109 / 3351-8110

Fax: (16) 3361-3176

CEP 13.565-905 - São Carlos - SP - Brasil

End. Eletrônico: progg@ufscar.br

FICHA DE CARACTERIZAÇÃO DE DISCIPLINAS

1. Programa de Pós-Graduação em:

Programa de Pós-Graduação em Química

2. Objetivo da Ficha: Alteração de disciplina.

Código da Disciplina	QUI.117	Total de Créditos	13	Início de Validade	1o. período de 2025
----------------------	---------	-------------------	----	--------------------	---------------------

Nome da Disciplina	Mecanismo de Reações Orgânicas
--------------------	--------------------------------

Campos a serem Alterados

☒ Código da Disciplina	☐ Nome da Disciplina	☐ Carga Horária	☒ Ementa
Código Anterior: QUI.502	☐ Créditos	☐ Pré-Requisitos	

Justificativa:

Nova grade curricular a partir de 2025

3. Carga Horária da Disciplina:

Aulas Teóricas	72	Aulas Práticas	0	Exercícios e Seminários	123
----------------	----	----------------	---	-------------------------	-----

4. Ementa da Disciplina:

- Aspectos gerais de cinética e termodinâmica de reação química: leis cinéticas de velocidade, métodos experimentais de monitoramento, determinação experimental de parâmetros termodinâmicos e das leis cinéticas de velocidade, TON e TOF, análise de amplitude energética, tensões anelares, efeito Torpe-Ingold, princípio da reatividade/seletividade, postulado de Hammond, postulado de Curtin-Hammett.
- Efeito cinético isotópico e tunelamento: princípios e aplicações na elucidação de mecanismos.
- Orbitais moleculares, natureza de ligações químicas e efeitos estereoeletrônicos em intermediários reativos: teoria dos Orbitais Moleculares, teoria dos Orbitais de Fronteira, equação de Klopman-Salem, hiperconjugação, hibridização, conformação, NBO, natureza dos estados de transição e regras de Baldwin.
- Relações Lineares de Energia Livre: Relação Quantitativa de Estrutura-Reatividade e Constantes de Hammett.
- Efeito do solvente e aspectos supramoleculares em reatividade química.
- Interações não-covalentes e seus efeitos em reatividade química e propriedades moleculares.
- Aspectos avançados envolvendo reações de substituição e eliminação: reatividade de carbocátions clássicos e não-clássicos, rearranjos, efeito do grupo vizinho e seletividade.
- Aspectos avançados envolvendo reações de adição e ciclização: grupos diretores, seletividades (régio e estéreo) em reações de adição eletrofílica, epoxidações e di-hidroxilação catalíticas,

hidroboração, hidrogenação catalítica e redução com metais.

9. Aspectos avançados envolvendo reações de adição e substituição acíclica: reagentes de adição e redução, métodos catalíticos, organometálicos e evolução dos modelos de seletividade (Felkin-Anh).

10. Aspectos avançados na química de enolatos: controle de geometria do enolato, modelos de seletividade em reações de adição/alquilação incluindo reações aldólicas mediados por enolatos metálicos (Zimmerman-Traxler), organocatálise, uso de auxiliares quirais, aldol de Mukaiama e adição de Michael.

11. Reações de Olefinação e Oxidação: Wittig, Horner-Wadsworth-Emmons, Corey-Chaykovsky, Jones, Swern, Dess-Martin, Pinnick e Oxidação catalítica com TEMPO.

5. Caráter da Disciplina:

Criada para o curso de:

☐

Mestrado

☐

Doutorado

☐

Mestrado Profissional

☒

Todos

Caráter para mestrado:

☐

Obrigatória para:

☒

Optativa para:

Química.

☐

Alternativa para:

☐

Área de Concentração para:

☐

Específica de Linha para:

Caráter para doutorado:

☐

Obrigatória para:

☒

Optativa para:

Química.

☐

Alternativa para:

☐

Área de Concentração para:

☐

Específica de Linha para:

Caráter para mestrado profissional:

☐

Obrigatória para:

☐

Optativa para:

☒

Alternativa para:

Ensino em Química, Química Tecnológica.

☐

Área de Concentração para:

☐

Específica de Linha para:

6. Disciplinas que São Pré-Requisitos:

7. Bibliografia Principal:

1- Alabugin, I. V. Stereoelectronic Effects: A Bridge Between Structure and Reactivity, John Wiley & Sons, Ltd., 2016.

2- Ahluwalia, V. K. Organic Reactions and Their Mechanisms 2ª ed., Springer, 2023.

3- Eric V. Anslyn, Dennis A. Dougherty Modern Physical Organic Chemistry, University Science Books, 2006.

4- Fleming, I. Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions John Wiley & Sons, 2010.

5- F. A. Carey, R. J. Sundberg Advanced Organic Chemistry Part A e Part B, 5ª ed., Springer, 2007.

8. Principais Docentes Responsáveis:

Marco Antonio Barbosa Ferreira

Kleber Thiago de Oliveira

9. Aprovação da Coordenação do Programa de Pós-Graduação:

Aprovada na 571a. reunião da coordenação deste programa de pós-graduação, realizada em 05/02/2025.

__/__/__

Assinatura do Coordenador do Programa

10. Aprovação do Centro:

Aprovada na 720a. reunião do Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia, realizada em 29/05/2025.

__/__/__

Assinatura do Diretor do Centro

11. Aprovação do Conselho de Pós-Graduação: