

Estudo Teórico de Reações Orgânicas

Créditos: 04 (03 Créditos Práticos e 01 Crédito Teórico)

Carga Horária: 60 horas

Ementa: Breve Revisão de Química Quântica. Principais Métodos Computacionais em Química Quântica. Exemplos Estudados: Barreiras de Rotação; Reação de Inversão da Amônia; Reação de Adição a Alcenos e a Dienos Conjugados; Reação de Ciclo-Adição; Reação Sigmatrópica [3,3] e Reação de Eliminação.

Programa:

1. Breve Revisão de Química Quântica:

- A Teoria Quântica (Radiação do Corpo Negro, Efeito Fotoelétrico, Átomo de Bohr, Átomo de Hidrogênio e Equação de Schrödinger);

2. Principais Métodos Computacionais em Química Quântica:

- Método Hartree-Fock;
- Métodos Correlacionados (CI, MPn, CC);
- Métodos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (BLYP, B3LYP, PBE, etc.)
- Métodos Semi-Empíricos (AM1, PM3, PM5, SAM1, RM1, etc.)

3. Exemplos Estudados

- Barreiras de Rotação: a) Álcool Vinílico, b) Compostos Acíclicos (Etano, Butano, Propano), c) Ciclo-Hexano, d) Metil-Ciclo-Hexano;
- Reação de Inversão da Amônia;
- Reação de Adição de HX (HBr e HCl) a Alcenos e a Dienos Conjugados;
- Reação de Ciclo-Adição: 1,3-Butadieno e Etileno (Diels-Alder);
- Reação Sigmatrópica [3,3] para 1,5-Hexadieno (Rearranjo de Cope);
- Reação de Eliminação: Descarboxilação de um Ácido β,γ -Insaturado.

Referências Bibliográficas:

- Allinger, N. L.; Cava, M. P.; Jongh, D. C.; *et al*, **Química Orgânica**, LTC, 2^a ed., 1976.
- Jensen, F., **Introduction to Computational Chemistry**, John Wiley & Sons Ltd., 2002.
- Cramer, C.J., **Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models**, John Wiley & Sons Ltd., 2^a ed., 2002.
- Foresman, J.B.; Frisch, A., **Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: A Guide to using Gaussian**, Gaussian Inc., 1993.