
Ano Letivo 2021-22

Unidade Curricular QUÍMICA ORGÂNICA III

Cursos CIÊNCIAS FARMACÊUTICAS (Mestrado Integrado)

Unidade Orgânica Faculdade de Ciências e Tecnologia

Código da Unidade Curricular 14881204

Área Científica QUÍMICA

Sigla

Código CNAEF (3 dígitos) 442

**Contributo para os Objetivos de
Desenvolvimento Sustentável - 4
ODS (Indicar até 3 objetivos)**

Línguas de Aprendizagem Português e Inglês

Modalidade de ensino

Presencial

Docente Responsável

Américo Eduardo de Castro Lemos

DOCENTE	TIPO DE AULA	TURMAS	TOTAL HORAS DE CONTACTO (*)
Américo Eduardo de Castro Lemos	T; TP	T1; TP1; TP2	19.5T; 20TP

* Para turmas lecionadas conjuntamente, apenas é contabilizada a carga horária de uma delas.

ANO	PERÍODO DE FUNCIONAMENTO*	HORAS DE CONTACTO	HORAS TOTAIS DE TRABALHO	ECTS
3º	S1	19.5T; 10TP	78	3

* A-Anual;S-Semestral;Q-Quadrimestral;T-Trimestral

Precedências

Sem precedências

Conhecimentos Prévios recomendados

Os conhecimentos adquiridos em TLQ, Q. Org.I e II serão importantes

Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências)

No final do curso o aluno deverá: Entender a nível avançado as principais características dos intermediários das reações e a sua participação em reações químicas relevantes, correlacionando a estrutura com a reatividade. Utilizar o conceito de simetria de orbitais na interpretação e desenvolvimento de reações concertadas incluindo ciclizações, cicloadições, rearranjos sigmatrópicos, carbenos, nitrenos, radicais livres, etc.

Conteúdos programáticos

I. Reações orgânicas não iónicas:

1. Reações Pericíclicas

a) Reações electrocíclicas e simetria de fase.

b) Reações de ciclo-adição: i) [4 + 2]; ii) [3 + 2]; iii) [2 + 2]; iv) [4 + 3]; v) reações chelotropicas [4 + 1]; [2 + 1]

c) Reações Sigmatropicas:

i) Definição. Migrações [1, j].

ii) Migrações [i, j]: [3,3],[2,3] e [3,5] : Mecanismos e seletividade.

2. Reações Radicalares:

i. carbenos e carbenoids

ii. nitrenos

iii. radicais livres.

II. Interação entre grupos funcionais:

1. Participação do grupo vizinho em reações de substituição.

2. Rearranjos moleculares.

2.1. Rearranjos para átomos de carbono electrodeficientes;

a) Wagner-Meerwein: i) clássicos de terpenos bicíclicos; ii) pinacol-pinacolona.

b) Rearranjo de Wolff.

2.2. Rearranjos para átomos de azoto electrodeficientes.

2.3. Rearranjos para átomos de oxigénio electrodeficientes.

Metodologias de ensino (avaliação incluída)

Exposição teórica com recursos multimédia e gráficos; folhas de exercícios de aplicação no final de cada capítulo; modelos moleculares e pequenos filmes ilustrativos das matérias/reações; tutoria nas horas de atendimento.

A avaliação nas aulas teóricas consistirá numa frequência no final das 7 semanas de aulas teóricas, exame final ou de recurso. Estas avaliações constarão de uma prova escrita versando toda a matéria teórica lecionada durante o semestre.

Bibliografia principal

- Carey, F. A.; Sundberg, R. J., Advance Organic Chemistry, Part A: Structure and Mechanisms and Part B: Reactions and Synthesis, 5th Ed., Springer, 2008.
- Clayden, Greeves, Warren and Wothers, Organic Chemistry, 2nd Ed., Oxford University Press, 2012.
- Fleming, I., Frontier Orbital and Organic Chemical Reactions, John Wiley and Sons, 1994.
- Fleming, I., Frontier Orbital and Organic Chemical Reactions: Student Edition, WileyBlackwell, 2009.
- Fleming, I., Pericyclic Reactions, Oxford University Press, 1999.
- Fringuelli, F.; Taticchi, A., The Diels-Alder reaction: selected practical methods, John Wiley & Sons, 2002.
- Kumar, S., Kumar, V., Sing S.P., Pericyclic Reactions, Elsevier, 2016.
- Miller, B., Advanced Organic Chemistry, Reactions and Mechanisms, 2nd Ed., Pearson Education, 2004.
- March, J., Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms and Structure, 8th Ed., Wiley, 2019.

Academic Year 2021-22

Course unit ORGANIC CHEMISTRY III

Courses PHARMACEUTICAL SCIENCES (Integrated Master's)

Faculty / School FACULTY OF SCIENCES AND TECHNOLOGY

Main Scientific Area

Acronym

CNAEF code (3 digits) 442

Contribution to Sustainable Development Goals - SGD (Designate up to 3 objectives) 4

Language of instruction Portuguese and English

Teaching/Learning modality Face to face

Coordinating teacher Américo Eduardo de Castro Lemos

Teaching staff	Type	Classes	Hours (*)
Américo Eduardo de Castro Lemos	T; TP	T1; TP1; TP2	19.5T; 20TP

* For classes taught jointly, it is only accounted the workload of one.

Contact hours	T	TP	PL	TC	S	E	OT	O	Total
	19.5	10	0	0	0	0	0	0	78

T - Theoretical; TP - Theoretical and practical ; PL - Practical and laboratorial; TC - Field Work; S - Seminar; E - Training; OT - Tutorial; O - Other

Pre-requisites

no pre-requisites

Prior knowledge and skills

TLQ, Q. Org I and II

The students intended learning outcomes (knowledge, skills and competences)

At the end of the course the student should: Understand at an advanced level the main characteristics of intermediate of the reactions and their participation in relevant chemical reactions, correlating structure with reactivity. Use the concept of orbital symmetry of Frontier orbitals in the interpretation and development of concerted reactions including cyclizations, cycloadditions, sigmatropic rearrangements, carbenes, nitrenes, free radicals, etc.

Syllabus

I - Non-ionic organic reactions

1. Pericyclic reactions

a) electrocyclic reactions and phase symmetry.

b) Cycloaddition reactions:.

i) [4 + 2].

ii) [3 + 2].

iii) [2 + 2]; [4 + 3]

iv) chelotropic reactions: [4 + 1]; [2 + 1]

c) Sigmatropic reactions:

i) Definition. Migration [1, j].

ii) Migration [i, j]: [3,3],[2,3] e [3,5] - Mechanisms and selectivity.

2. Radical reactions

i. carbenes and carbenoids

ii. nitrenes

iii. free radicals

II - Interaction between functional groups

1. Participation of neighboring group in substitution reactions

2. Molecular rearrangements

2.1. Rearrangements to electro-deficient carbon atoms;

a) Wagner-Meerwein: i) classical bicyclic terpenes; ii) pinacol-pinacolone.

b) rearrangement of Wolf:.

2.2. Rearrangements to electrodeficient nitrogen atoms:

2.3. Rearrangements to electrodeficient oxygen atoms

Teaching methodologies (including evaluation)

Lectures with multimedia features and graphics; Application exercise sheets at the end of each chapter; molecular models and small illustrative films of materials / reactions; tutoring in the hours of care.

The evaluation will consist in lectures at a frequency at the end of seven weeks of lectures, final exam or appeal. These evaluations will consist of a written test dealing all the theoretical subjects taught during the semester

Main Bibliography

- Carey, F. A.; Sundberg, R. J., Advance Organic Chemistry, Part A: Structure and Mechanisms and Part B: Reactions and Synthesis, 5th Ed., Springer, 2008.
- Clayden, Greeves, Warren and Wothers, Organic Chemistry, 2nd Ed., Oxford University Press, 2012.
- Fleming, I., Frontier Orbital and Organic Chemical Reactions, John Wiley and Sons, 1994.
- Fleming, I., Frontier Orbital and Organic Chemical Reactions: Student Edition, WileyBlackwell, 2009.
- Fleming, I., Pericyclic Reactions, Oxford University Press, 1999.
- Fringuelli, F.; Taticchi, A., The Diels-Alder reaction: selected practical methods, John Wiley & Sons, 2002.
- Kumar, S., Kumar, V., Sing S.P., Pericyclic Reactions, Elsevier, 2016.
- Miller, B., Advanced Organic Chemistry, Reactions and Mechanisms, 2nd Ed., Pearson Education, 2004.
- March, J., Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms and Structure, 8th Ed., Wiley, 2019.