

SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
CONSELHO SUPERIOR DE ENSINO E PESQUISA

RESOLUÇÃO Nº 412 - DE 25 DE ABRIL DE 1977

EMENTA:- Autoriza realização do Curso de Aperfeiçoamento em "TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR E A REATIVIDADE QUÍMICA".

O REITOR DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ, no uso da competência que lhe faculta o Art. 3º, alínea "v", do Regimento da Reitoria, e tendo em vista o que consta do processo nº005.323/77, promulga a seguinte

R E S O L U Ç Ã O :-

Art. 1º - Fica aprovada, "ad-referendum" do Conselho Superior de Ensino e Pesquisa, a realização do Curso de Aperfeiçoamento em "TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR E A REATIVIDADE QUÍMICA", sob a responsabilidade do Departamento de Química do Centro de Ciências Exatas e Naturais, que se regerá pelo Regulamento anexo parte integrante desta Resolução.

Art. 2º - Revogam-se as disposições em contrário.

Reitoria da Universidade Federal do Pará, em 25 de abril de 1977.



Prof. Dr. CLÓVIS CUNHA DA GAMA MALCHER

Reitor

Presidente do Conselho Superior de Ensino e Pesquisa

REGULAMENTO DO CURSO DE APERFEIÇOAMENTO EM "TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR E A REATIVIDADE QUÍMICA"

1. Da Natureza do Curso: Aperfeiçoamento

2. Da Necessidade do Curso:

Um curso sobre Teoria do Orbital Molecular de Huckel (OMH) para docentes justifica-se por dois prismas:

- a) aperfeiçoamento didático, ou seja, aprofundamento dos conhecimentos adquiridos, ao nível de graduação, na área de Estrutura Molecular e/ ou Reatividade Química;
- b) aplicação em pesquisas que eventual ou essencialmente incluam o OMH; quanto a este item b o programa ~~deixa~~ entrever áreas de pesquisa que poderão beneficiar-se com o curso: Farmacologia e mecanismos de atividade biológica, Reatividade Química e Espectroscopia Molecular. Finalmente mencione-se que os cálculos do OMH em geral não necessitam um computador de porte maior que atualmente disponível na UFPa., e assim o estímulo à utilização de tais cálculos não trará um ônus sensível sobre a nossa Universidade.

3. Das Justificativas:

A estrutura do curso adapta-se as exigências do Regulamento Geral (Reg. Geral, art. 106).

4. Da constituição e funcionamento:

4.1- Coordenação didático-científica: Departamento de Química do Centro de Ciências Exatas e Naturais.

4.2- Professor responsável: José Glauco Ribeiro Tostes

4.3- Designação: Teoria do Orbital Molecular e a Reatividade Química.

4.4- Organização do Regime Didático.

4.4.1- O curso contará com dois professores: José Glauco Ribeiro Tostes, Professor Adjunto do Departamento de Química, Mestre em Ciências em Química pelo Instituto Militar de Engenharia, e Harry Serruya, Professor Assistente do Departamento, que participou de cursos ao nível de pós-graduação no Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro.

4.4.2- A parte de exposição da matéria do curso ficará a cargo do Professor Serruya, a quem caberá a exposição programada para o primeiro período letivo com respectivas aulas de exercícios, e do professor Glauco, a quem caberá a exposição programada

para o segundo período letivo, com respectivas au las de exercícios. Eventualmente os professores poderão alternar esse quadro em algumas aulas.

4.4.3- Utilizar-se-ão recursos auxiliares existentes no Departamento: Slides, filmes, etc. Adicionalmente, o computador IBM 1130 da Universidade será também utilizado.

4.4.4- O curso terá duração de 120 horas (Resolução nº 175 do CONSEP de 24/9/1973), com uma carga horária semanal de 5 horas.

4.4.5- A carga horária prevista para o 1º período é de 47 horas e para o 2º semestre 73 horas.

5. Calendário

5.1- Início: 13/04/77

5.2- Término: 04/12/77

5.3- Duração: 25 semanas.

6. Carga Horária

6.1- Semanal: 5 horas-aula

6.2- Carga horária total: 120 horas-aula

6.3- Créditos: oito (8) créditos (Res.nº 175 do CONSEP de 24/9/1973)

7. Verificação de Aprendizagem

Será realizada através de testes fornecidos ao longo do curso, de uma avaliação semestral de 4 horas, e de uma avaliação final de 4 horas.

8. Critério de Aprovação

Será conceitual o critério de aprovação.

Os conceitos emitidos estarão determinados a:

E - Excelente

B - Bom

R - Regular

I - Insuficiente

M - Mau

S - Sem rendimento

e para obter aprovação o aluno deverá alcançar pelos menos o conceito Regular.

9. Condições para matrícula e números de vagas.

9.1- Será estabelecida a seguinte escala de prioridade para matrícula:

1a. prioridade - Docentes dos Departamentos de Química e de Engenharia Química.

2a. prioridade - Docentes e graduados que apresentem no seu currículo tópicos de Estrutura Molecular.

- 9.2- Números de vagas: 40
- 10-Local de funcionamento: Campus Universitário do Guamã - Pavilhões.
- 11-Recursos materiais e financeiros
Não será necessária, pois o Departamento dispõe de recursos **financeiros**.
- 12-Corpo Docente:
Professor José Glauco Ribeiro Tostes e professor Harry Serruya ambos lotados no Departamento de Química.
- 13-Programa
- 14-Requisitos para concessão de certificados:
Duas condições concomitantes são necessárias para a concessão de certificados de aprovação:
14.1- Frequência a pelo menos 70% das aulas do curso (Reg. Geral, art. 69).
14.2- Obter conceito igual ou superior a R.
Para certificado de frequência é exigida apenas a observância do item 14.1
- 15-Inscrições: Secretaria do Centro de Ciências Exatas e Naturais do dia 6 de abril até 14 de abril de 1977.

PROGRAMA - CALENDÁRIO

DIA	HORA	ASSUNTO
ABRIL		
14	19:00 - 21:00	Noções de Teoria quântica
15	19:00 - 20:00	Exercícios
19	19:00 - 21:00	Orbitais atômicos e moleculares
22	19:00 - 20:00	Exercícios
25	19:00 - 21:00	Teoria de Huckel; Energia dos Orbitais Moleculares
28	19:00 - 21:00	Coeficiente dos orbitais moleculares
29	19:00 - 20:00	Exercícios
MAIO		
03	19:00 - 21:00	Heteroátomos
05	19:00 - 21:00	Densidade eletrônica e ordem de ligação'
06	19:00 - 20:00	Exercícios
10	19:00 - 21:00	Energia de deslocalização; energia de <u>Lo</u> calização
12	19:00 - 21:00	HOMO; espectro eletrônico
13	19:00 - 20:00	Exercícios
17	19:00 - 21:00	Densidade de carga e reatividade

19	19:00 - 21:00	Variação de α e β
20	19:00 - 20:00	Exercícios
24	19:00 - 21:00	Eletrons de Fronteira
26	19:00 - 21:00	Comprimento de Ligação
27	19:00 - 21:00	Exercícios
31	19:00 - 21:00	Momento dipolo

JUNHO

02	19:00 - 21:00	Transições $\pi \rightarrow \pi^*$ em polienos
03	19:00 - 20:00	Exercícios
07	19:00 - 21:00	Transições $\pi \rightarrow \pi^*$ em aromáticos
10	19:00 - 21:00	Exercícios
13	19:00 - 21:00	Efeitos de Heteroátomos em transição $\pi \rightarrow \pi^*$
15	19:00 - 21:00	Energia de Ressonância
17	18:00 - 22:00	Avaliação semestral

AGOSTO

16	19:00 - 21:00	Teoria do estado de transição
18	19:00 - 21:00	Mecanismo de substituição aromática
19	19:00 - 20:00	Exercícios
23	19:00 - 21:00	Aplicação de índices de reatividade
25	19:00 - 21:00	Continuação da aula anterior
26	19:00 - 20:00	Exercícios
30	19:00 - 21:00	Compostos com heteroátomos

SETEMBRO

01	19:00 - 21:00	Continuação da aula anterior
02	19:00 - 20:00	Exercícios
08	19:00 - 21:00	Propriedades de íons carbônio
09	19:00 - 20:00	Exercícios
13	19:00 - 21:00	Continuação da aula anterior
15	19:00 - 21:00	Equilíbrio de íons carbônio
16	19:00 - 20:00	Exercícios
20	19:00 - 21:00	Continuação da aula anterior
22	19:00 - 21:00	Reações de ion carbônio
23	19:00 - 20:00	Exercícios
27	19:00 - 21:00	Continuação da aula anterior
29	19:00 - 21:00	Íons Carbônio não clássicos
30	19:00 - 20:00	Exercícios

 OUTUBRO

04	19:00 - 21:00	Continuação da aula anterior
06	19:00 - 21:00	Fenômenos droga receptor
07	19:00 - 20:00	Exercícios
11	19:00 - 21:00	Continuação da aula anterior
13	19:00 - 20:00	Exercícios
25	19:00 - 21:00	Continuação da aula anterior
27	19:00 - 21:00	Fenômenos ácido-base

 NOVEMBRO

03	19:00 - 21:00	Continuação da aula anterior
04	19:00 - 20:00	Exercícios
08	19:00 - 21:00	Continuação da aula anterior
10	19:00 - 21:00	Métodos autoconsistentes de geração de Orbitais Moleculares
11	19:00 - 20:00	Exercícios
17	19:00 - 21:00	Continuação da aula anterior
18	19:00 - 20:00	Exercícios
22	19:00 - 21:00	Métodos semiempírico
24	19:00 - 21:00	CNDO e INDO
25	19:00 - 20:00	Exercícios
29	19:00 - 21:00	Mindo

 DEZEMBRO

01	19:00 - 21:00	Interação de configurações
06	19:00 - 21:00	Química Teórica; o quadro atual
09	18:00 - 22:00	Avaliação final

Carga horária do 1º período letivo - 47 horas-aula

Carga horária do 2º período letivo - 73 horas-aula

PROGRAMA ANALÍTICO

1. Introdução
 - 1.1- Teoria Quântica
 - 1.2- Estrutura atômica e molecular
 - 1.3- Orbitais Moleculares
2. Cálculos de Orbitais Moleculares de Huckel
 - 2.1- Aproximação π - eletrônica de Huckel
 - 2.2- Energias e coeficientes dos orbitais
 - 2.3- Tratamento de heteroátomos
 - 2.4- Densidades eletrônicas
 - 2.5- Ordem de ligação e valência livre

3. Índices de Orbitais Moleculares
 - 3.1- Propriedades relacionadas a energia
 - 3.1.1- Energia de deslocalização eletrônica
 - 3.1.2- Energia de deslocalização
 - 3.2- Propriedades relacionadas as energias dos orbitais
 - 3.2.1- Espectro eletrônico
 - 3.2.2- Fenômenos associados com o HOMO
 - 3.3- Propriedades relacionadas a carga
 - 3.3.1- Densidades de carga e reatividade
 - 3.3.2- Parâmetros relacionados a variação de α e β
 - 3.3.3- Teoria do elétron de fronteira
 - 3.3.4- Ordem de ligação e comprimento de ligação
4. Propriedades Moleculares
 - 4.1- Momento dipolo
 - 4.2- Espectroscopia eletrônica
 - 4.2.1- Transições $\pi \rightarrow \pi^*$ em polienos
 - 4.2.2- Transições $\pi \rightarrow \pi^*$ em hidrocarbonetos aromáticos
 - 4.2.3- Efeitos de heteroátomos em transições $\pi \rightarrow \pi^*$
 - 4.3- Energia de Ressonância
5. Reatividade; aplicações em Química orgânica
 - 5.1- Substituição aromática
 - 5.1.1- Teoria do estado de transição.
 - 5.1.2- Mecanismo de substituição aromática eletrofílica
 - 5.1.3- Aplicação de índices de reatividade
 - 5.1.4- Compostos com Heteroátomos
 - 5.2- Íons Carbônio
 - 5.2.1- Propriedades de íons carbônio
 - 5.2.2- Equilíbrio com íons carbônio
 - 5.2.3- Reações de íons carbônio
 - 5.2.4- Íons carbônio não clássicos
6. Reatividade; aplicações em farmacologia
 - 6.1- Considerações sobre fenômenos droga-receptor
 - 6.2- Mecanismos de drogas como fenômenos de ligação covalente
 - 6.3- Fenômenos ácido-base
7. Métodos OM mais avançados
 - 7.1- Métodos OM autoconsistentes
 - 7.2- Interação de configurações.

