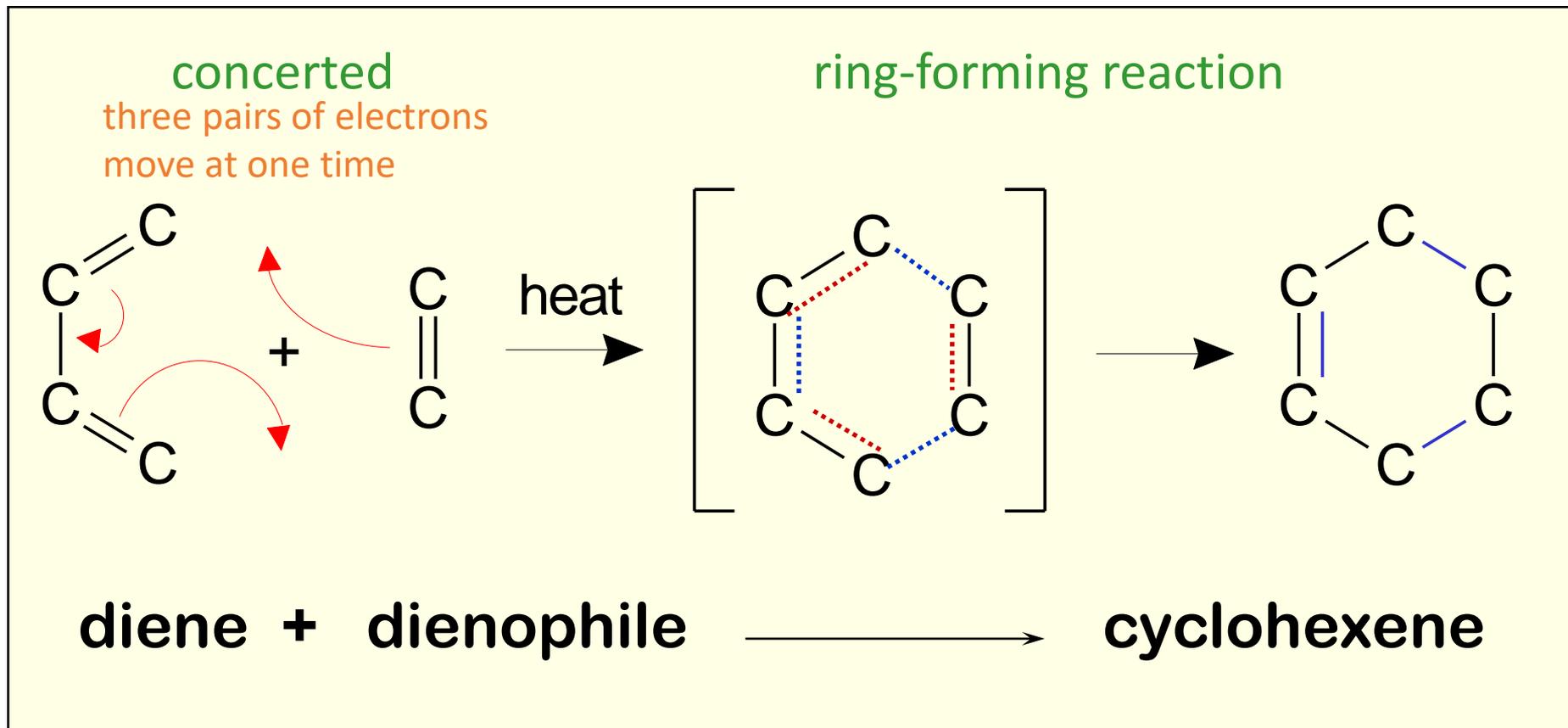


REAÇÃO DE DIELS-ALDER

The Diels-Alder Reaction



NOTE:  = gain of bond order
 = loss of bond order

Fundamentos da Reação de Diels- Alder

História e Descoberta da Reação

Desenvolvimento da Reação

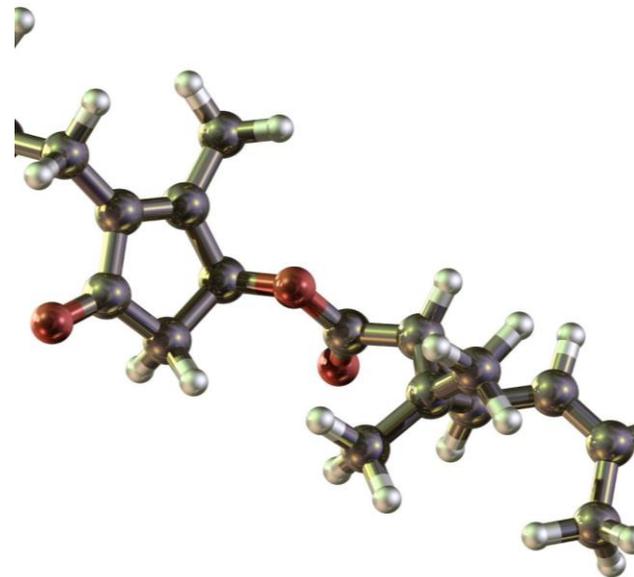
A reação de Diels-Alder foi desenvolvida por Otto Diels e Kurt Alder, revolucionando a síntese orgânica na química.

Prêmio Nobel de Química

Otto Diels e Kurt Alder receberam o Prêmio Nobel de Química em 1950 por suas contribuições à química orgânica.

Impacto na Síntese Orgânica

A reação Diels-Alder revolucionou a forma como os químicos constroem estruturas moleculares, sendo fundamental na síntese de compostos orgânicos.



Definição e Importância da Reação

Reação de Diels-Alder

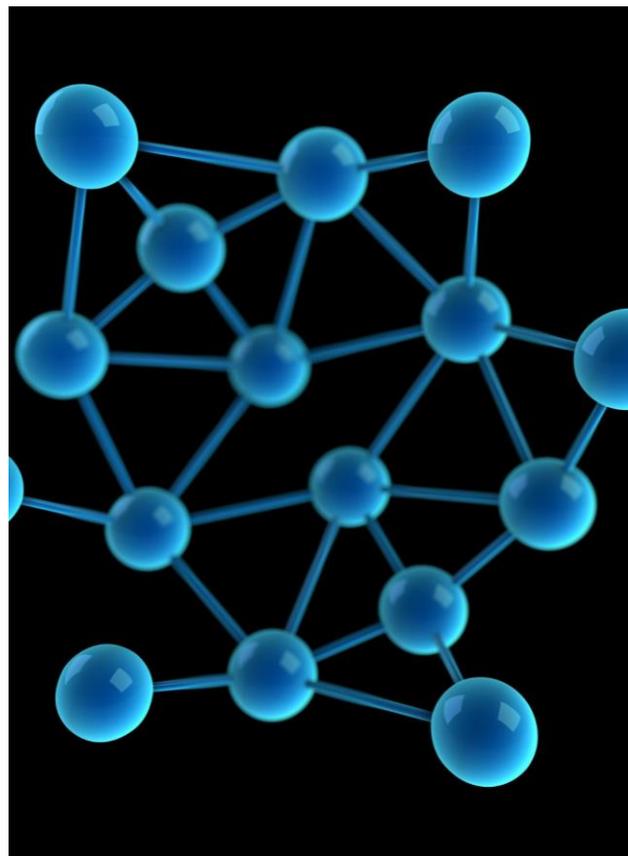
A reação de Diels-Alder é uma cicloadição [4+2] entre um diene e um dienófilo, formando um produto cíclico.

Gerando Anéis Complexos

Esta reação é crucial para a síntese de anéis complexos, fundamentais em compostos orgânicos e farmacêuticos.

Importância na Indústria Farmacêutica

A reação é essencial na indústria farmacêutica devido à sua eficiência em criar estruturas moleculares complexas.



Aplicações Práticas na Química Orgânica

Síntese de Compostos Naturais

A química orgânica é essencial na síntese de compostos naturais, permitindo a criação de substâncias bioativas para a medicina.

Desenvolvimento de Medicamentos

As reações de química orgânica são fundamentais no desenvolvimento de novos medicamentos, visando tratar diversas condições de saúde.

Produção de Polímeros

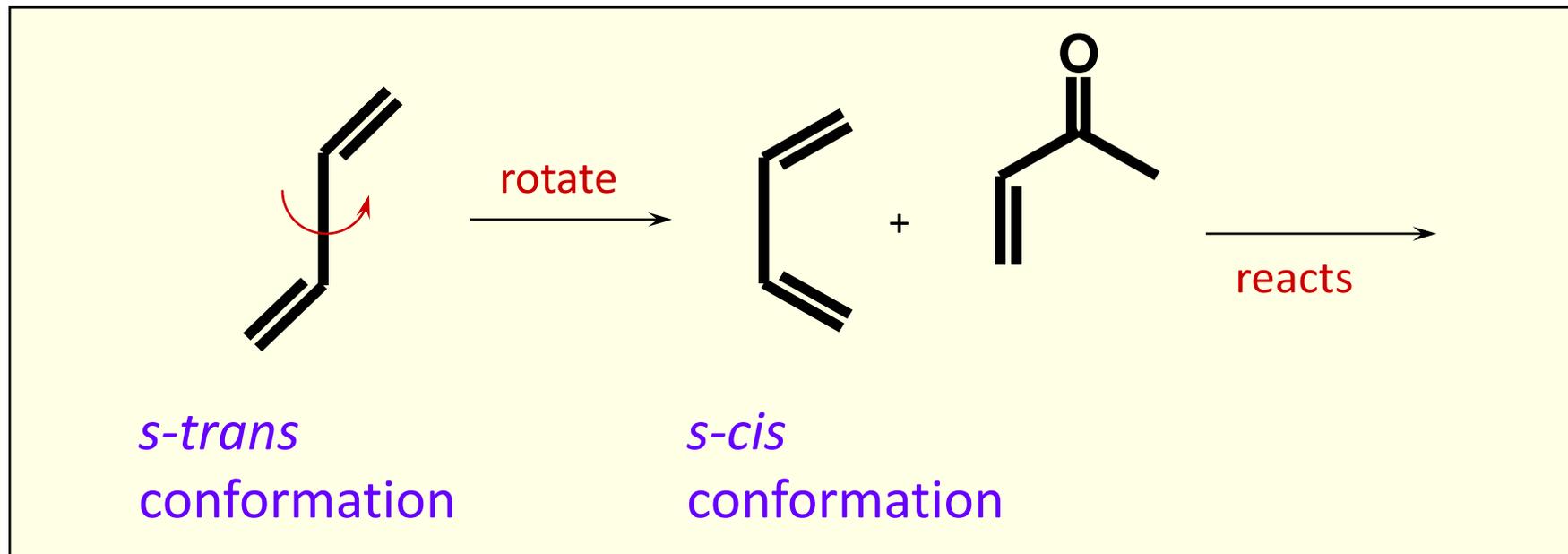
As reações orgânicas permitem a produção de polímeros, que têm aplicações em diversos setores, como embalagem e construção.



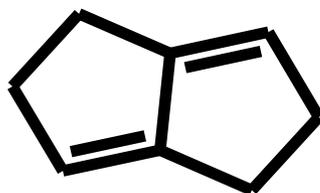


Aspectos Teóricos

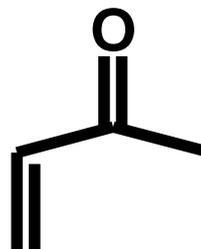
THE DIENE MUST BE ABLE TO ADOPT THE *S-CIS* CONFORMATION



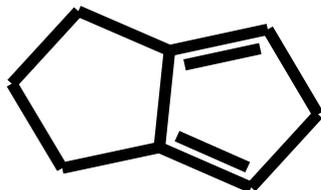
does not react



+



reacts normally



Teoria dos Orbitais e Interações Eletrônicas

Sobreposição de Orbitais

A teoria dos orbitais moleculares explica como os orbitais do diene e do dienófilo se sobrepõem, formando novos orbitais ligados.

Reação de Diels-Alder

A interação entre diene e dienófilo é crucial para a formação de produtos na reação de Diels-Alder, uma importante reação em química orgânica.

Formação de Novos Produtos

A compreensão da teoria dos orbitais moleculares permite prever a formação de novos produtos durante a reação de Diels-Alder.



Mecanismo da Reação

Descrição do Diene e Dienófilo

Definição de Diene

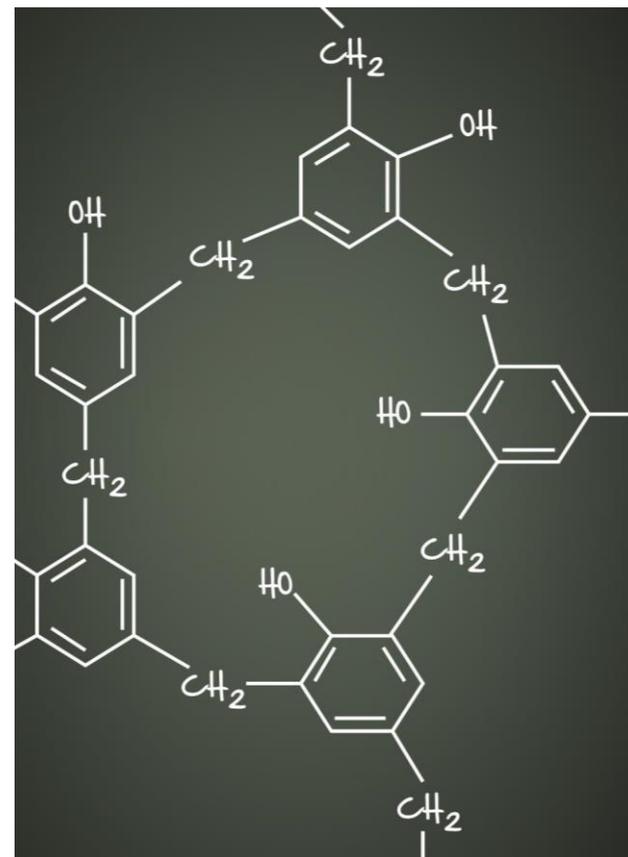
Um diene é um composto que possui duas ligações duplas conjugadas em sua estrutura, permitindo reações químicas específicas.

Característica do Dienófilo

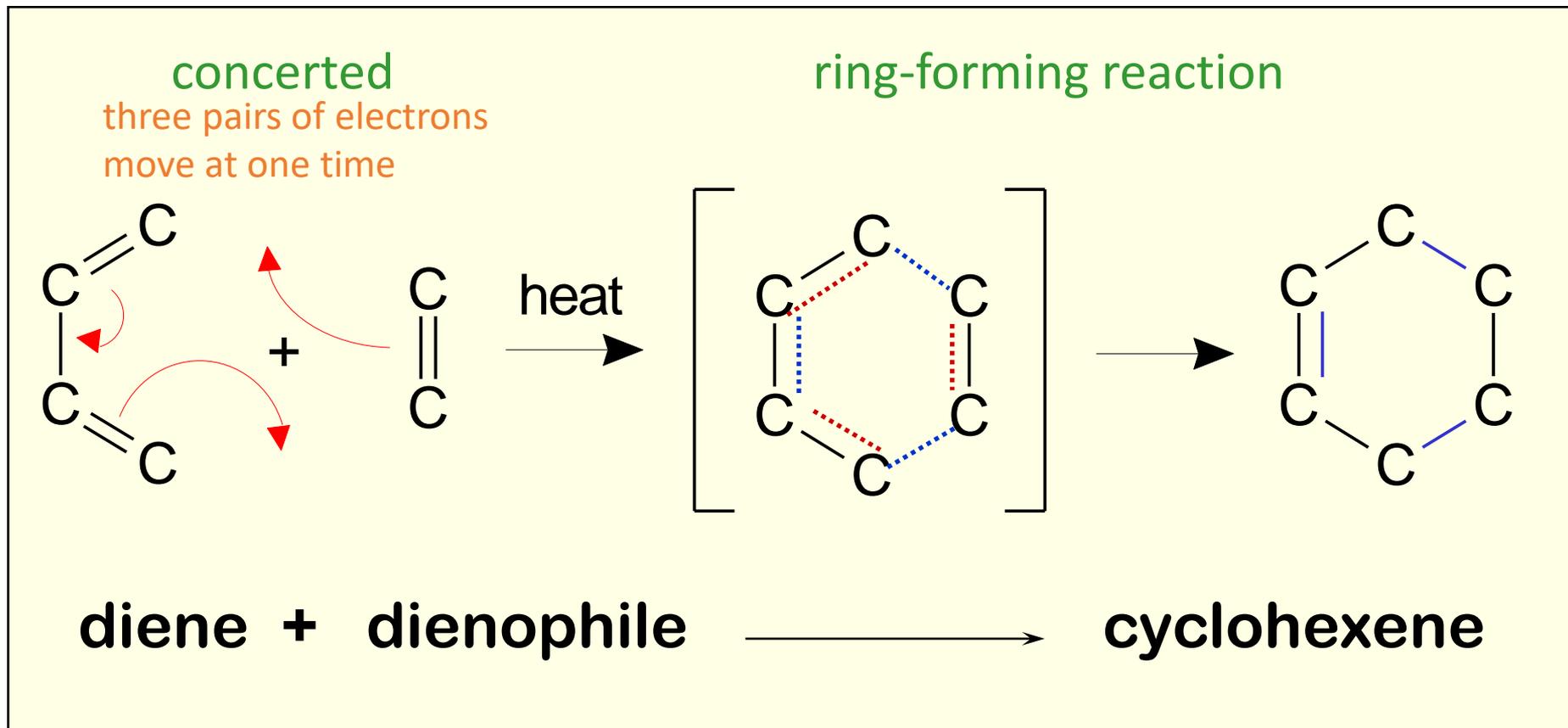
O dienófilo é uma molécula que contém uma ligação dupla que pode ser atacada pelo diene durante a reação, sendo fundamental para a síntese.

Importância na Reação

A escolha correta do diene e do dienófilo é crucial para o sucesso da reação de Diels-Alder, uma importante reação em química orgânica.

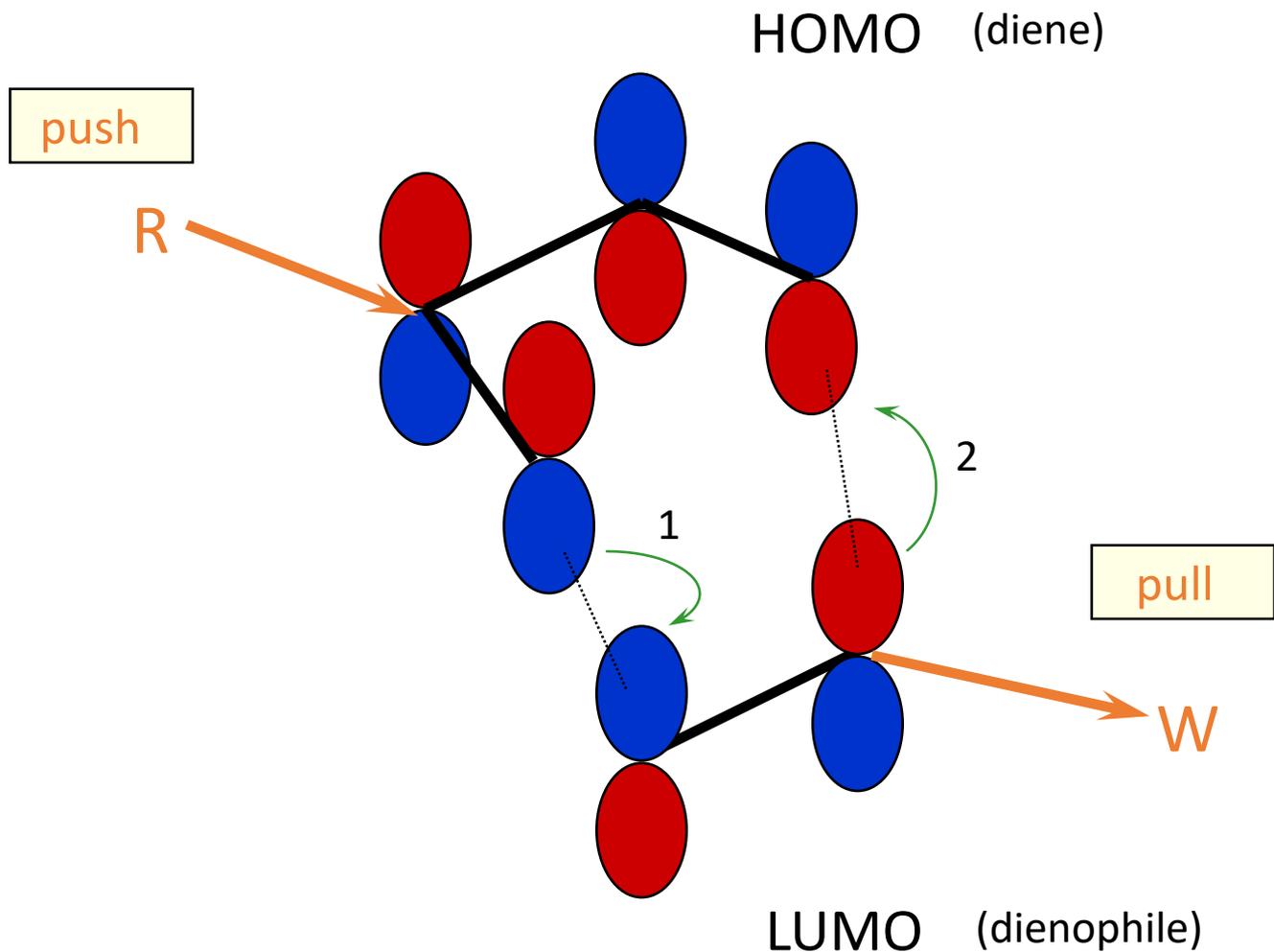


The Diels-Alder Reaction



NOTE:  = gain of bond order
 = loss of bond order

DIELS-ALDER REACTION

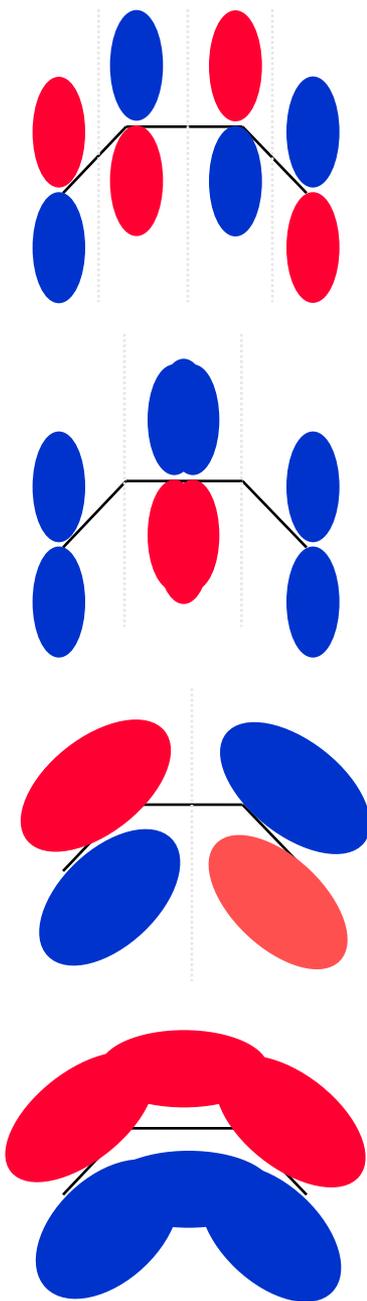


The reaction is concerted - all of the orbitals are aligned in a 6-ring.

The HOMO of the diene donates electrons into the LUMO of the dienophile.

BUTADIENE

ETHYLENE



π_4

π_3

HOMO

π_2

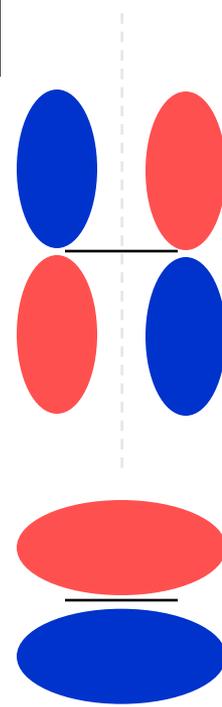
π_1

The HOMO of the diene donates electrons into the LUMO of the dienophile.

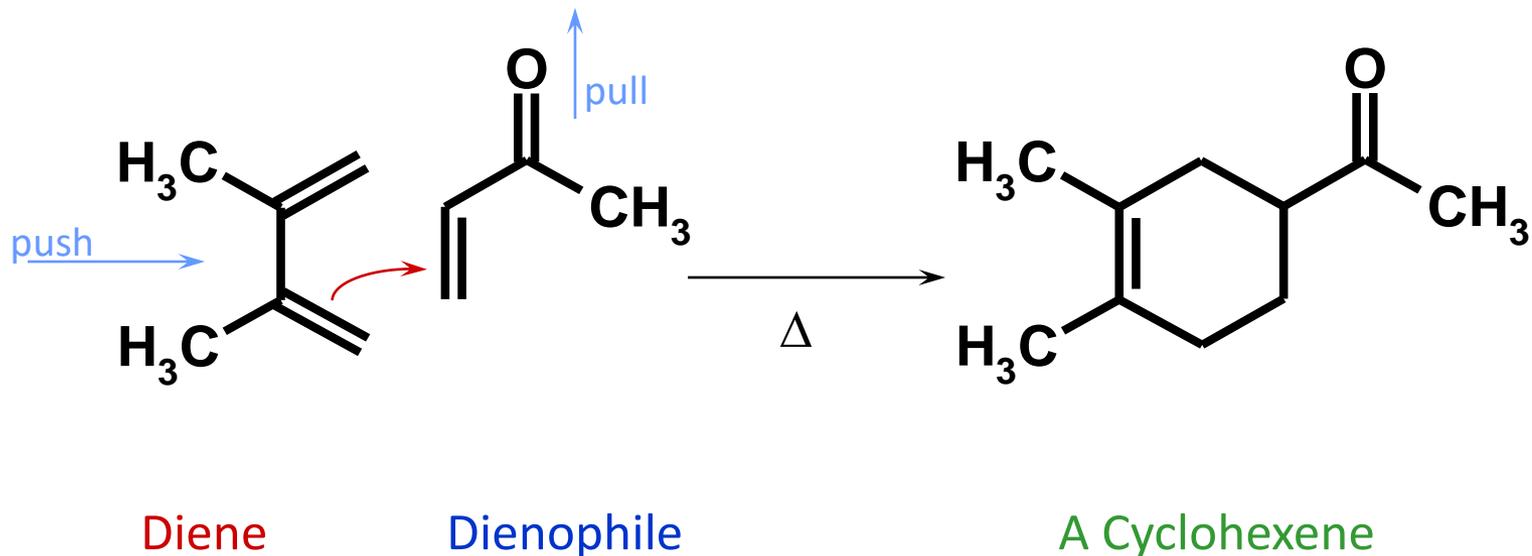
LUMO

π^*

π



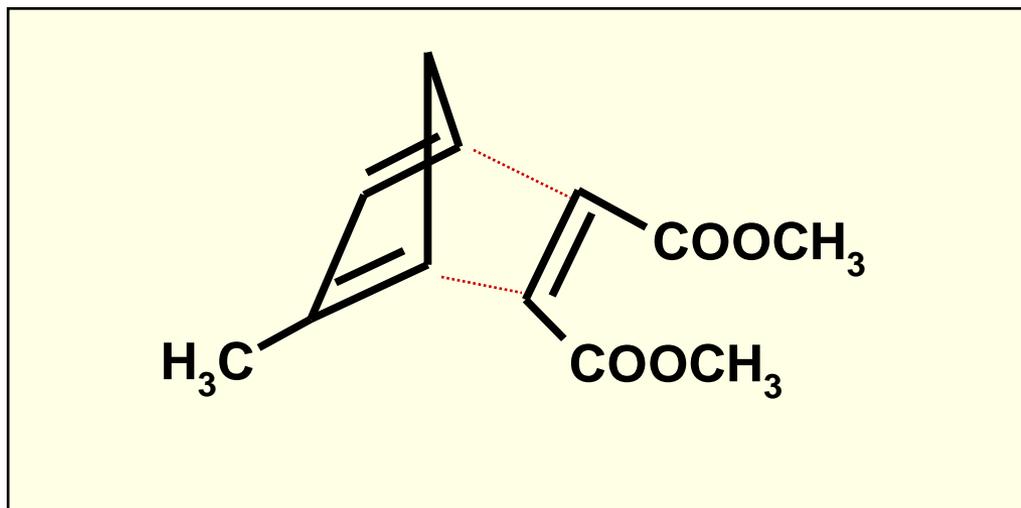
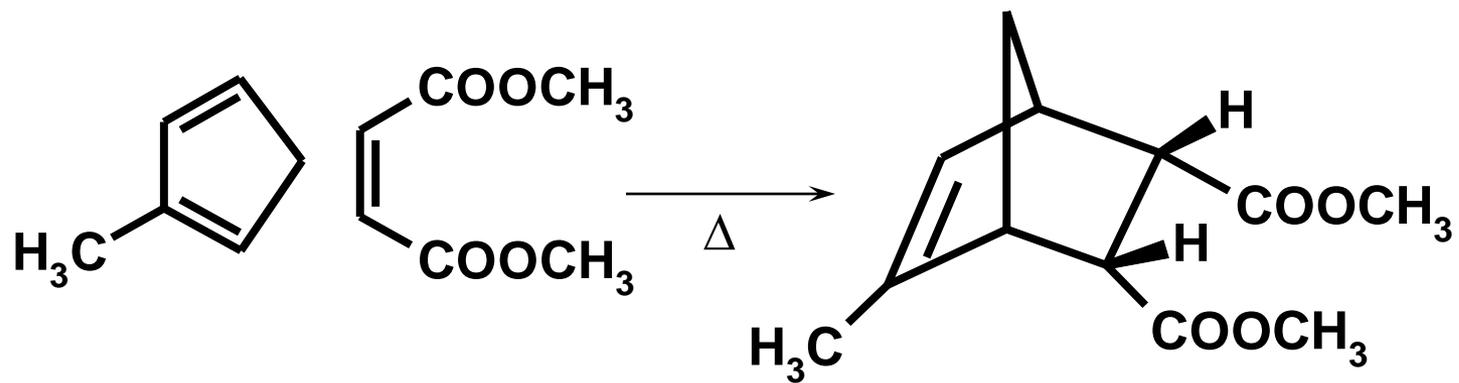
EXAMPLE - WITH ELECTRONIC FACTORS



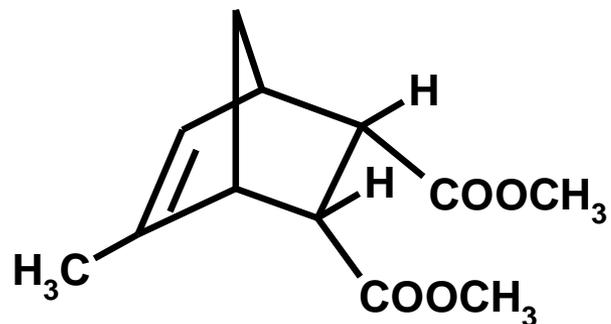
Works best if the dienophile has electron-withdrawing groups, and the diene has electron-donating groups.

The HOMO of the diene donates **PUSHES** electrons into the LUMO of the dienophile **PULLS**.

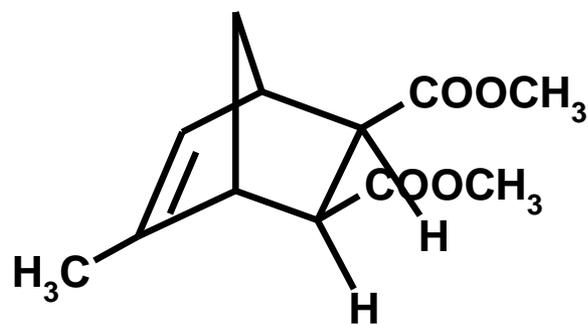
FORMATION OF A BICYCLIC COMPOUND



THE REACTION IS USUALLY STEREOSELECTIVE



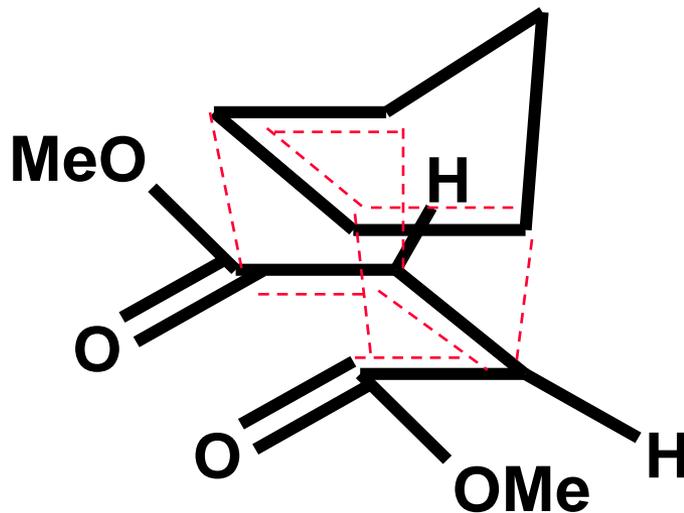
endo



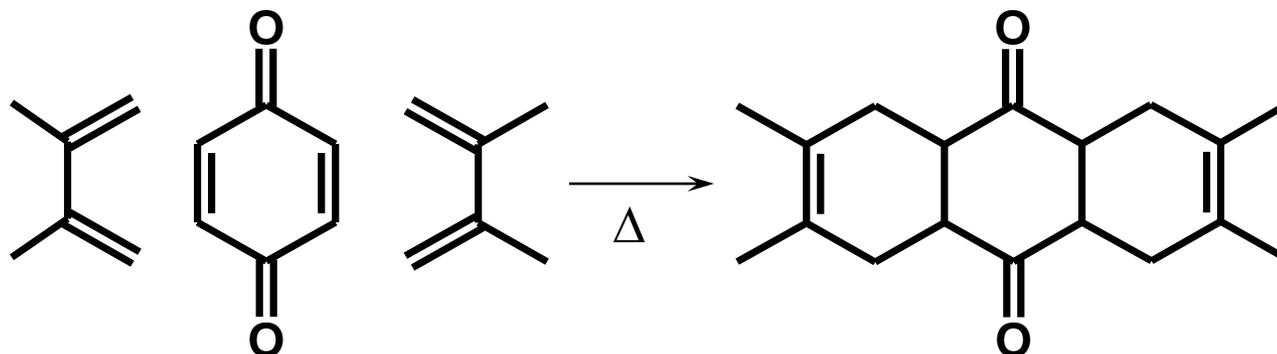
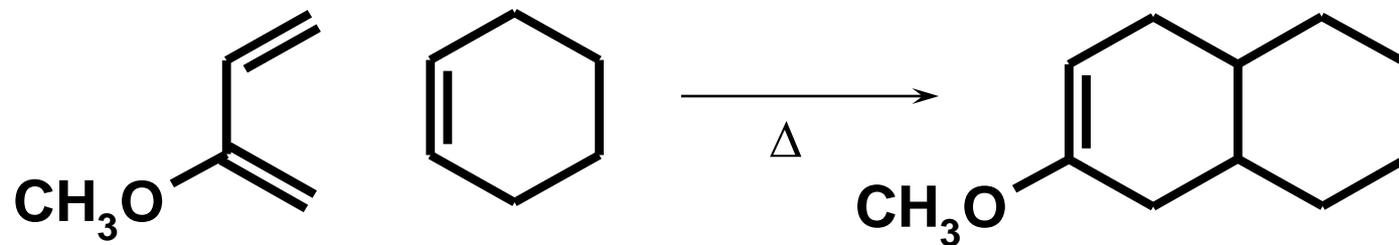
exo

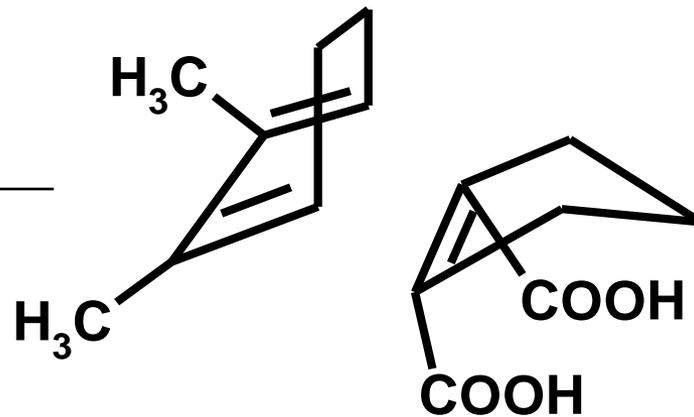
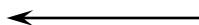
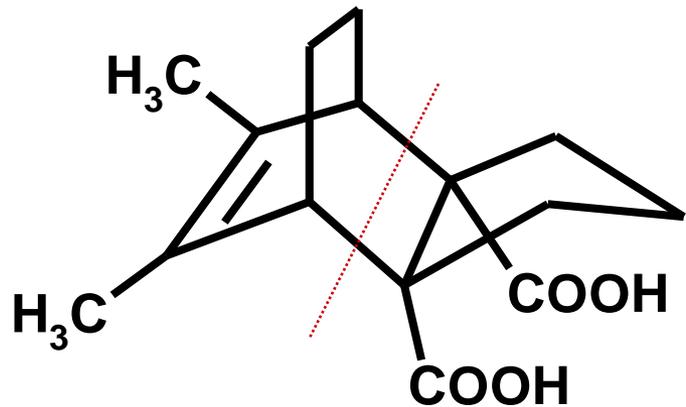
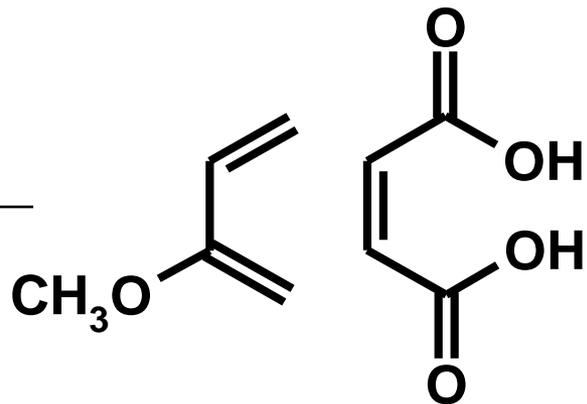
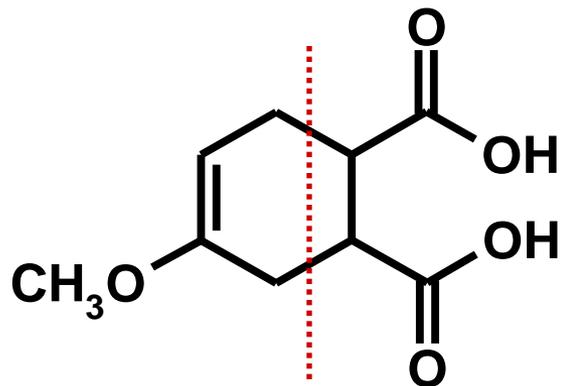
The endo product is usually preferred.

It has been suggested that the pi systems like to establish maximum overlap during the reaction.

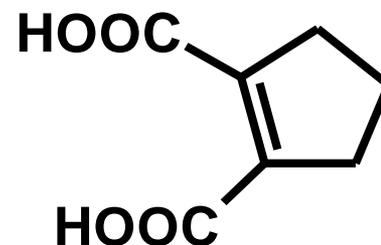
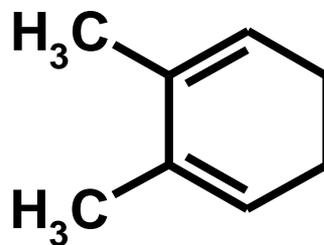


MORE DIELS-ALDER REACTIONS



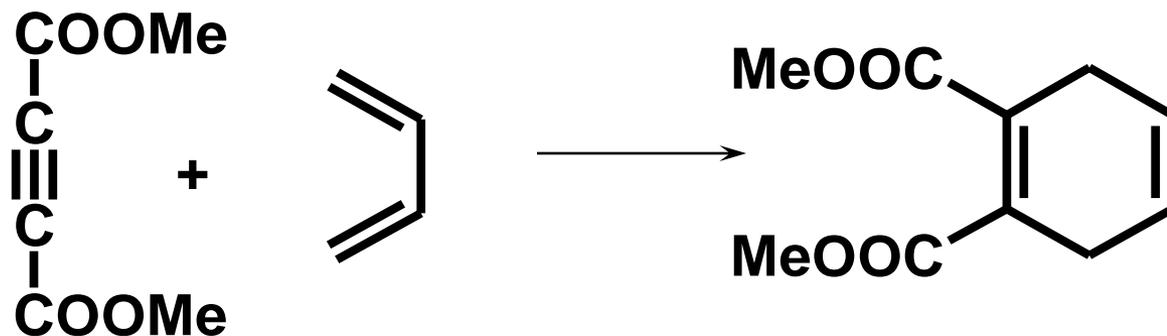


OR



Retrosynthesis

ACETYLENES (ALKYNES)



If the dienophile is an alkyne a cyclohexadiene is formed.