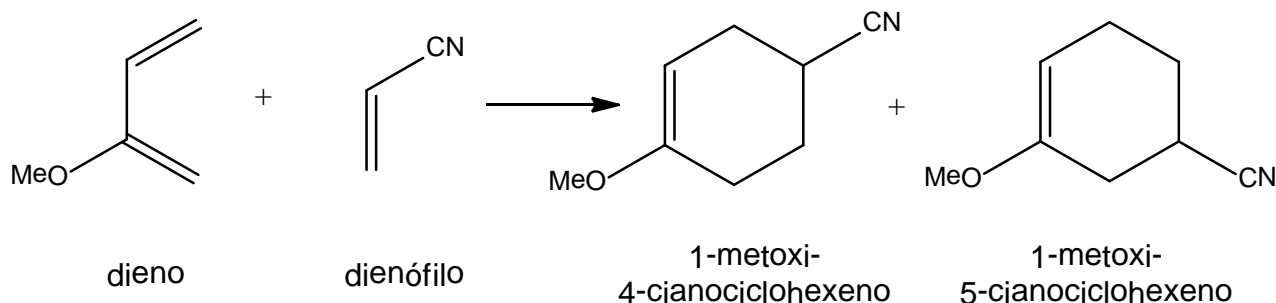


Práctica 28: La Reacción de Diels-Alder

Las reacciones de Diels-Alder que más se emplean conllevan la adición de un dieno rico en electrones con un dienófilo pobre en electrones.



Woodward y Hoffmann pusieron de manifiesto que esta reacción implica el solapamiento del orbital molecular ocupado de más alta energía (HOMO) del dieno con el orbital molecular no ocupado de menor energía (LUMO) del dienófilo.

1. Dibuje el HOMO del 2-metoxibutadieno. ¿Entre qué átomos está localizado?.
2. Dibuje el LUMO del acrilonitrilo. ¿Entre qué átomos está localizado?.
3. Oriente los dos fragmentos de tal forma que puedan solapar el HOMO del dieno con el LUMO del dienófilo. ¿Cuál es el producto que se debe obtener?.
4. Examine los Estados de Transición para los aductos en los que el metoxilo y el nitrilo quedan en posiciones relativas 1,4 y 1,5. Examine los productos correspondientes a estas reacciones, el 1-metoxi-4-cianociclohexeno y el 1-metoxi-5-cianociclohexeno. ¿Cuál debe de ser el producto cinético?. En este caso, ¿coincide con el producto termodinámico?.
5. Finalmente, examine la geometría del Estado de Transición de menor energía. Mida todos los enlaces C-C. Dibuje la estructura de Lewis y represente los enlaces parciales (los que se están formando y rompiendo) con líneas punteadas. ¿Cuántos enlaces C-C se han roto parcialmente en el Estado de Transición?. ¿Cuántos enlaces se han formado parcialmente?.