

Um Estudo Experimental e Teórico da Reação de Diels-Alder de Derivados de *Para*-Benzoquinonas.

Maria C. Donatoni (PG), Marciana P. Uliana (PG), Bruno M. Servilha (PG), Timothy J. Brocksom (PQ)*, Kleber T. de Oliveira (PQ).

Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos-SP, 13565-905, Brasil.

*brocksom@terra.com.br

Palavras Chave: Diels-Alder, carbometóxi-*para*-benzoquinonas, cálculos teóricos.

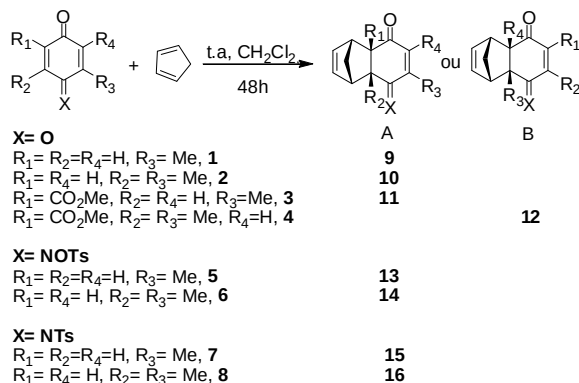
Introdução

A reação de Diels-Alder de derivados de *para*-benzoquinonas fornece cicloadutos funcionalizados para a síntese de terpenos bioativos.¹ Neste trabalho apresentamos nossos resultados mais recentes sobre os estudos experimentais e teóricos da reatividade relativa de algumas *para*-benzoquinonas, suas mono-oximas tosiladas, as suas *N*-tosiliminas, e algumas carbometóxi-*para*-benzoquinonas, nas reações de Diels-Alder com o ciclopentadieno.

Resultados e Discussão

As reações de Diels-Alder foram estudadas de forma comparativa e não sintética, a temperatura ambiente em diclorometano por 48 h (Esquema 1), e os resultados são fornecidos na Tabela 1.

Os estudos teóricos destas mesmas reações foram realizados utilizando-se a metodologia DFT e a base de cálculo B3LYP/6-31G(d,p) (Gaussian 03W). As diferenças de energia (em kcal/mol) entre os orbitais moleculares de fronteira HOMO do ciclopentadieno e LUMO dos dienófilos são apresentadas na Figura 1.



Esquema 1. As reações de Diels-Alder.

Tabela 1. Os resultados experimentais das reações de Diels-Alder.

Entrada	Dienófilo	Produto	Rendimento
1	1	9 A	90
2	2	10 A	70
3	3	11 A	95
4	4	12 B	80
5	5	13 A	83
6	6	14 A	NR*
7	7	15 A	92
8	8	16 A	90

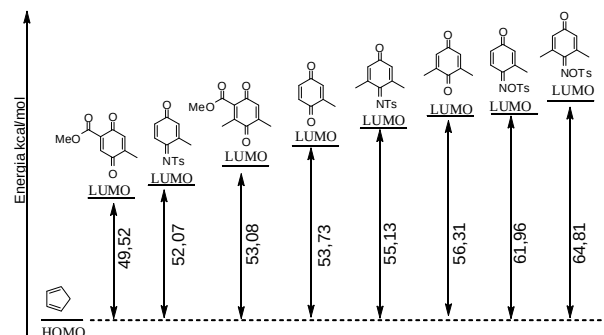


Figura 1. As diferenças de energia dos orbitais HOMO do ciclopentadieno e LUMO dos dienófilos

Conclusão

Os estudos experimentais e teóricos da reatividade relativa de algumas *para*-benzoquinonas e derivados, na reação de Diels-Alder com o ciclopentadieno, demonstram uma excelente correlação.

Agradecimentos

Os autores agradecem FAPESP, CAPES e CNPq.

¹ Brocksom, T. J.; et. al. *Diels-Alder Reactions in the Synthesis of Higher Terpenes in Organic Synthesis: Theory and Applications*, T. Hudlicky (ed). JAI/Elsevier Science, Vol. 5, p. 39-87, 2001.