

239

ESTUDO DA TAUTOMERIA DE NAFTAZARINAS BETA-SUBSTITUÍDAS POR MODELAGEM MOLECULAR. Anderson Azeredo Souza, Mariele Velho Avila, Carlos Wilian Feltrin, Luiz Antonio Mazzini Fontoura (orient.) (ULBRA).

As naftoquinonas formam uma classe de materiais naturais e sintéticos de grande e variada importância, possuindo aplicações especialmente como corantes e fármacos. Entre as poliidroxi-naftoquinonas, a naftazarina (1) encontra-se em posição de destaque devido às características estruturais peculiares, às suas propriedades e a sua versatilidade como intermediário sintético. Ela e seus derivados beta-substituídos apresentam possibilidade de tautomeria, o que influencia muitas das suas propriedades, em especial as espectroscópicas. Neste trabalho, a tautomeria dos compostos 2-7 foi estudada por cálculo AM1. Onde d_1 e d_2 são os comprimentos das ligações indicadas. Os resultados obtidos indicam que, para $X=O$, os tautômeros **a** e **b** apresentam energias próximas, sendo o primeiro deles mais estável. Para compostos com $X=NH$, por outro lado, **b** é mais estável.

