

309

ESTUDO DA TAUTOMERIA DE NAFTAZARINAS BETA-SUBSTITUÍDAS POR MÉTODO AB INITIO. *Gabriel Castanho, Luiz Antonio Mazzini Fontoura (orient.) (ULBRA).*

Naftoquinonas são compostos de ocorrência natural, podendo ser encontradas em fungos, líquens, equinodermos e plantas superiores. Apresentam aplicações como fármacos e corantes. Uma das características de hidroxinaftoquinonas é a possibilidade de tautomeria, o que resulta em diferentes propriedades espectroscópicas. Um exemplo deste fenômeno é o que ocorre com a naftazarina (1) e seus derivados. Este trabalho apresenta um estudo do fenômeno de tautomeria de naftazarinas beta-substituídas por técnicas computacionais. Em trabalho anterior, foi estudado por cálculo semi-empírico AM1 a interconversão entre os tautômeros a e b (esquema 1) tendo sido identificados os caminhos de transferência de hidrogênio, os dois possíveis intermediários c e d e os quatro estados de transição. Em sequência ao trabalho, as oito estruturas tiveram suas energias determinadas por uso de cálculo ab initio Hartree-Fock no conjunto de bases 6-31G*. Para X=O (2 e 3) foi verificado que a é o tautômero mais estável e que a passagem para b não apresentam rota preferencial. Para X=NH (5 e 6), por outro lado, b é o tautômero mais estável, e o caminho preferencial é aquele que passa pelo intermediário d (figura 1).