

Síntese de ésteres derivados do pentan-2-ol com ácidos alifáticos catalisada por diferentes lipases.

Lucas Panini Valcanaia (IC), Mateus Mittersteiner (IC) e Paulo Cesar de Jesus (PQ)*

Departamento de química, Universidade Regional de Blumenau, Blumenau, SC, 89010-971.

lucas.panini@gmail.com; mateus_mitt@hotmail.com; pq@furb.br

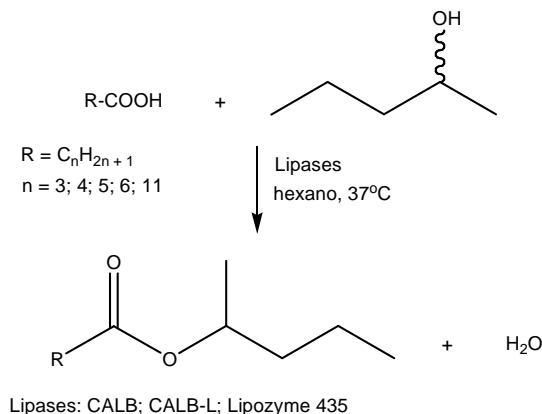
Palavras Chave: lipases, pentan-2-ol, esterificação.

Introdução

Lipases vem sendo utilizadas em síntese orgânica como catalisadores porque elas são seletivas, apresentam disponibilidade comercial, baixo custo, além de não requererem cofatores.¹ Reações catalisadas por enzimas geralmente têm a sua seletividade limitada pelo tipo de substrato, solvente, cadeia e concentração. Neste trabalho foi investigada a esterificação do pentan-2-ol com diferentes ácidos alifáticos catalisada por diferentes lipases em meio orgânico. O (S)-pentan-2-ol é um importante intermediário quiral para a síntese de potenciais drogas anti-Alzheimer.²

Resultados e Discussão

Em um erlenmeyer de 125 mL foi adicionado 25 mL de hexano, 100mg de lipase (CALB-L imobilizada em sílica gel 60, Lipozyme 435 e Novozyme CALB) 0,01 mol de álcool (±)-pentan-2-ol e 0,01 mol de ácido orgânico (butanóico, pentanóico, hexanóico, heptanóico e dodecanóico) (1:1). As reações foram realizadas em uma incubadora TE 420 – termostatizada a 37°C, a um rotação de 150rpm, durante 7 dias. O **Esquema I** mostra a reação de formação dos ésteres derivados do pentan-2-ol.



Esquema I

A formação dos produtos foi acompanhada por cromatografia em camada delgada (ccd). Os produtos foram isolados por cromatografia em coluna (sílica gel 60, 70-230 mesh) utilizando como eluente hexano:acetato de etila (15:1). Os ésteres foram caracterizados por espectroscopia de infravermelho. Os rendimentos obtidos para os

ésteres podem ser observados na **Tabela 1**. As lipases mostraram ser efetiva na preparação dos ésteres, sendo que a CALB e CALB-L apresentaram os melhores rendimentos.

Tabela 1 - Rendimento dos ésteres obtidos na esterificação do pentan-2-ol com diferentes ácidos alifáticos.

Lipase	Éster	Rend. (%) ^(a)
Lip. 435	butanoato de sec-pentila	19,3
	pentanoato de sec-pentila	24,3
	hexanoato de sec-pentila	21,5
	heptanoato de sec-pentila	37,7
	dodecanoato de sec-pentila	24,0
CALB	butanoato de sec-pentila	19,1
	pentanoato de sec-pentila	48,2
	hexanoato de sec-pentila	38,4
	heptanoato de sec-pentila	56,0
	dodecanoato de sec-pentila	52,0
CALB-L	butanoato de sec-pentila	40,5
	pentanoato de sec-pentila	42,7
	hexanoato de sec-pentila	55,0
	heptanoato de sec-pentila	65,0
	dodecanoato de sec-pentila	45,0

(a) Rendimento de éster isolado

Foi realizado o estudo do efeito do solvente utilizando a reação de formação do pentanoato de sec-pentila com a CALB em solventes como acetonitrila (log P -0,33), diclorometano (log P 0,93), ciclohexano (log P 3,2) e hexano (log P 3,5). Os melhores rendimentos foram com hexano (48%) e ciclohexano (58%).

Conclusões

Pode-se observar que as enzimas utilizadas catalisam a formação dos alcanóatos de sec-pentila com bons rendimentos, sendo favorecidas por solventes com log P ≥ 2,0. Uma avaliação da enantioseletividade das diferentes lipases deve ser realizada para confirmar a eficiência da catálise.

Agradecimentos

Ao INCT Catálise; ao CNPq e a FURB.

¹ Ghanem, A; *Tetrahedron:Asymmetry*. **2007**, 63, 1721-1754.

² Ren, L.; Xu, T.; He, R.; Jiang, Z.; Zhou, H.; Wei, P.; *Tetrahedron:Asymmetry*. **2013**, 24, 259-253.