

Otimização das condições de esterificação do 1-feniletanol catalisado pela lipase de *Pseudomonas cepacia* imobilizada em cerâmica.

Fabricio Baldi¹ (PG), Allan Dalposso (IC)¹ e Paulo César de Jesus^{1,2} (PQ)* pcj@furb.br

¹Departamento de química, ²IPTB-FURB, Universidade Regional de Blumenau, Blumenau, SC, 89010-971.

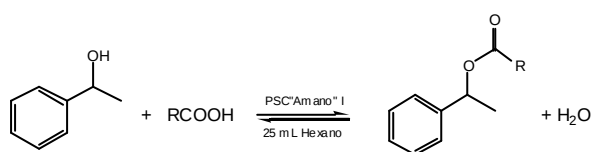
Palavras Chave: lipases, razão molar, temperatura.

Introdução

Lipases são freqüentemente utilizadas na resolução de compostos racêmicos devido a sua alta enantiosseletividade, disponibilidade comercial, baixo custo, além de não requererem cofatores¹. Reações catalisadas por enzimas geralmente têm a sua seletividade limitada pelo tipo de substrato, solvente, cadeia e concentração². Neste trabalho foi avaliada a influência da temperatura, razão molar e cadeia carbônica do ácido na esterificação do 1-feniletanol em hexano, catalisado pela lipase de *Pseudomonas cepacia* (PSC "Amano" I, 30 U/mg de sódio) imobilizada em cerâmica.

Resultados e Discussão

Em um erlenmeyer foi adicionado 25 mL de hexano, 100mg de lipase de *Pseudomonas cepacia* imobilizada em cerâmica, 0,02 mols de álcool 1-feniletanol e de ácido orgânico (butanóico, hexanóico, octanóico, decanóico e dodecanóico) (1:1). As reações foram realizadas em uma incubadora termostatzada a 37°C, durante 168 horas (Equação 1).

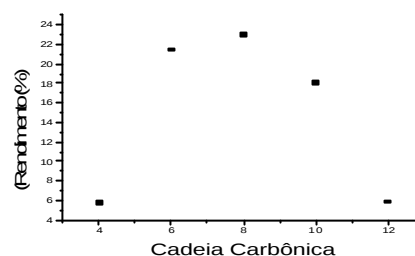


R = n-C₃H₇; n-C₅H₁₁; n-C₇H₁₅; n-C₉H₁₉; n-C₁₁H₂₃

(Eq. 1)

Os produtos foram isolados por cromatografia em coluna (sílica gel 60, 70-230 mesh) utilizando como eluente hexano:acetato de etila (15:1). Foram obtidos os ésteres com os seguintes rendimentos: butanoato de 1-feniletila (5,9%), hexanoato de 1-feniletila (21,5%), octanoato de 1-feniletila (23%), decanoato de 1-feniletila (18,1%), dodecanoato de 1-feniletila (5,9%). Os ésteres foram caracterizados por espectroscopia de infravermelho. Foi observado que acima de 8 carbonos na cadeia do ácido ocorre uma diminuição acentuada no rendimento (Figura 1). Considerando que o melhor rendimento foi obtido com o ácido octanóico foram realizados estudos da razão

molar e influência da temperatura para a formação do octanoato de 1-feniletila, fixando a concentração molar do álcool em 0,02 mols e variando o ácido (0,01, 0,02 e 0,03 mols); a influência da razão molar pode ser observado na Figura 2. Quanto ao efeito da temperatura obteve-se os seguintes rendimentos:



25°C (23,8%), 30°C (24,0%) e 37°C (23,0%).

Figura 1. Relação entre o número de carbonos da cadeia do ácido e o rendimento da esterificação.

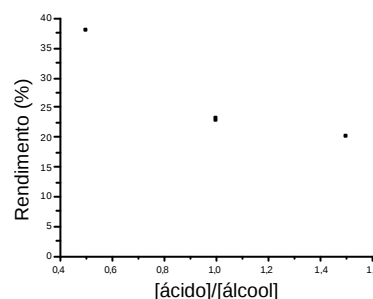


Figura 2. Efeito da razão molar ácido/álcool na preparação do octanoato de 1-feniletila.

Conclusões

A PSC I mostrou ser eficiente na esterificação do 1-feniletanol com os ácidos octanóico e hexanóico sendo que, cadeias carbônicas superiores ou inferiores a eles fazem o rendimento cair drasticamente. A faixa de temperatura estudada não afetou o rendimento porém o álcool em excesso melhorou o mesmo.

Agradecimentos

Amano Pharmaceutical Co e MCT/CNPq

¹ Kashima, C.; Miuhara, S.; Yokoyama, Y.; *Tetrahedron:Asymmetry*. **2002**, 13, 1713-1719.

² Mezzetti, A.; Keith C.; Kazlauskas, R. J.; *Tetrahedron: Asymetry*.**2003**, 14, 3917-3924.