

## Efeito do solvente na esterificação enantiosseletiva do ( $\pm$ ) 1-feniletanol catalisada pelas lipases de *Pseudomonas cepacia* e *Candida antarctica*.

Fabricio Baldi (PG)<sup>1</sup>, Alberto Wisniewski Jr. (PQ)<sup>2</sup>, Paulo Cesar de Jesus (PQ)<sup>\*1,2</sup> e Maria da Graça Nascimento(PQ)<sup>3</sup>. baldif@bol.com.br

1. Departamento de Química, 2. IPTB, Universidade Regional de Blumenau, Blumenau, SC, 89012-900.

3. Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, 88040-900.

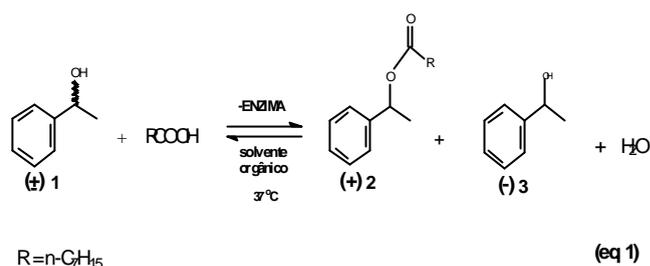
Palavras Chave: enantiosseletividade, solventes, lipases.

### Introdução

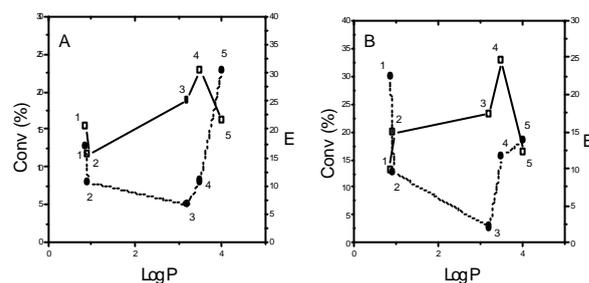
Embora seja reportado que o solvente afeta a especificidade das lipases em biotransformações enantiosseletivas, a racionalização dos mecanismos destes efeitos e o estabelecimento de modelos que permitem antecipar o comportamento de um determinado sistema ainda não estão totalmente esclarecidos.<sup>1,2,3</sup> Neste trabalho foi verificado o efeito de diferentes solventes orgânicos na enantiosseletividade das lipases de *Pseudomonas cepacia* (LPSC-I, 30 U/mg de sólido, Amano Lot. ILPSAX08531K) e *Candida antarctica* (CAL-B, 10 U/mg de sólido, Novozyme Lot. LC 200217) para a reação de esterificação do ácido octanóico com o ( $\pm$ ) 1-feniletanol (Acros Organics, Lot: A018703001).

### Resultados e Discussão

Em um erlenmeyer de 125 mL foi adicionado 100mg de LPSC-I ou CAL-B, 0,02 mols de ( $\pm$ )1-feniletanol e ácido octanóico (1:1) e 25 mL de solvente orgânico (éter de petróleo (1) Log P 0,85; diclorometano(2) Log P 0,93; cicloexano(3) Log P 3,2; hexano(4) Log P 3,5 e heptano(5) Log P 4,0) a 37°C, durante 7 dias. Os produtos foram isolados por cromatografia em coluna utilizando sílica gel 60 (70-230 mesh) e hexano:acetato de etila (15:1) como eluente. O (+)-éster obtido com os diferentes solventes, foi caracterizado por espectroscopia de infravermelho e os excessos enantioméricos (ee) determinados por polarimetria. Ambas lipases mostraram preferência pelo enantiômero com rotação óptica positiva (Equação 1).



As conversões e os valores de enantiosseletividade (E) para o (+)-éster 2, em função da polaridade do solvente, estão apresentados na Figura 1.



**Figura 1**– Variação na conversão (%) e enantiosseletividade (E) para a LPSC-I (A) e CAL-B (B). (?)E vs Log P; (?)Conversão (%) vs Log P.

Observa-se que, para ambas lipases, ao utilizar cicloexano e hexano as conversões ao octanoato de (+)-1-feniletanol foram de 20-33%. Porém, a CAL-B foi mais efetiva que a LPSC-I. Por exemplo, com hexano, as conversões a (+)-2 foram de 23% para a LPSC-I e 33% para a CAL-B. Com solventes mais polares as conversões diminuíram e os valores de E aumentaram. Estes resultados sugerem que pode estar ocorrendo uma competição cinética, ou seja, à medida que um dos enantiômeros é consumido o outro também compete pelo sítio ativo das lipases.

### Conclusões

Os dados mostraram que os solventes apolares favorecem a catálise na formação do (+)-éster-2 em meio orgânico. Porém, a enantiosseletividade da

LPSC-I e CAL-B na resolução do ( $\pm$ )1-feniletanol foi apenas moderada, apresentando valores de  $E < 30$ .

### Agradecimentos

DQ-FURB, DQ-UFSC, Amano Pharmaceutical Co, Novozyme e MCT/CNPq.

---

<sup>1</sup> Menzzetti, A.; Keith, C. e Kazlauskas, R. J. *Tetrahedron: Asymmetry*. **2003**, 14, 3917-3924.

<sup>2</sup> Suan, C.e Sarmidi, M. R. *J. of Molecular Catalysis B: Enzymatic*. **2004**, 28, 111-119.

<sup>3</sup> Ashraf, G. *Tetrahedron*. **2007**, 63 (8), 1721-1754.