

Resolução enzimática do (±)-citronelol via esterificação com diferentes ácidos alifáticos.

Viviane Quintino Martini (PG)¹, Fabricio Baldi (PG)¹ e Paulo Cesar de Jesus (PQ)^{*1,2}

¹Departamento de Química - ²IPTB - Universidade Regional de Blumenau - FURB, Blumenau, SC, 89012-900
vqm_3@hotmail.com, pcj@furb.br.

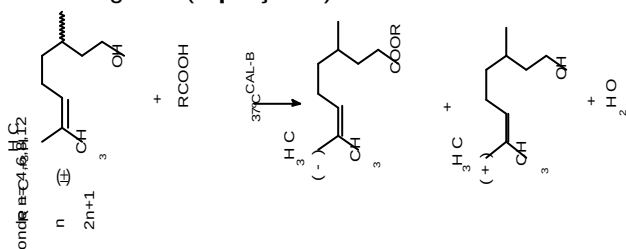
Palavras Chave: Citronelol, lipase, resolução.

Introdução

Álcoois e ácidos terpênicos quirais têm sido utilizados como intermediários sintéticos na produção de feromônios.¹ A resolução cinética dos ácidos e álcoois racêmicos, via reações enantiosseletivas catalisada por enzimas tem sido uma alternativa útil para a preparação destes intermediários opticamente ativos.² No presente trabalho, foi avaliado a resolução do (±)-citronelol via esterificação com diferentes ácidos alifáticos catalisada pela lipase de *Candida antarctica* (CAL-B, 10 u/mg de sólido, Novozymes, Lot. LC 200217).

Resultados e Discussão

Foi adicionado em um erlenmeyer de 125 mL, 0,02 mol de (±)-citronelol, 0,02 mol de ácido alifático (butírico, hexanóico, octanóico e dodecanóico) 100 mg da CAL-B e 25 mL de hexano. As reações foram realizadas durante 7 dias em uma incubadora termostatzada (TE 420 da Tecnal) a 37°C. Os produtos foram isolados por cromatografia em coluna utilizando sílica gel 60 (70-230 mesh) e hexano:acetato de etila (15:1) como eluente, e caracterizados por IV e RMN de ¹H. A rotação ótica foi determinada por polarimetria, mostrando a preferência da enzima pelo isômero com rotação ótica negativa (**Equação 1**).



As porcentagens de conversão para a formação dos (-)-ésteres pode ser observados na **Figura 1**, mostrando que um aumento na cadeia do ácido aumenta linearmente a conversão para éster. Os resultados dos excessos enantioméricos para os ésteres obtidos foram: butirato de (-)-citronela ($ee_p=3,0$, $ee_s=13$), hexanoato de (-)-citronela ($ee_p=5,0$, $ee_s=19$) e octanoato de (-)-citronela ($ee_p=2,0$, $ee_s=26$), valores estes baixos. Para os estudos da razão molar para a formação do butirato

de (-)-citronela foi fixada a concentração molar do álcool em 0,02 mols e variado o ácido em 0,005; 0,01; 0,02 e 0,03 mols. Os resultados podem ser observados na **Figura 2**, onde pode ser observado que em baixas concentrações de ácido a formação do éster é favorecida.

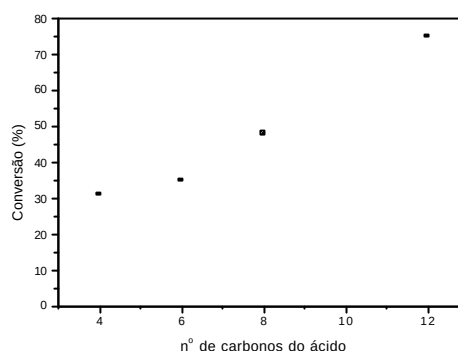


Figura 1 - Variação da conversão pela cadeia do ácido na formação dos alcanatois de (-)-citronela.

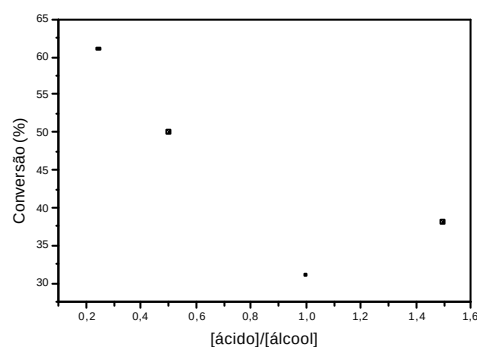


Figura 2 - Efeito da razão molar do ácido/álcool na preparação do butirato de (-)-citronela.

Conclusões

A CAL-B mostrou ter baixa seletividade para o (±)-citronelol, com valores de excessos baixos e $E<2$, apesar da boa atividade catalítica, onde as conversões variaram de 31 a 75%.

Agradecimentos

DQ-FURB, DQ-UFSC, Novozymes e MCT/CNPq.

¹Gotor, V.; Gonzalez-Sabin, J.; Rebollo, F.; Tetrahedron Asymmetry, **2005**, 16, 3070-3076.

²Jesus, P.C.; Silva, P.L.F.; João, J.J.; Nascimento, M.G.; Synthetic Communications, **1998**, 28, 15, 2893.