

## Otimização das condições de esterificação do ácido ( $\pm$ )-citronílico com n-octanol catalisado pela lipase de *Candida antarctica*.

Viviane Quintino Martini (PG)<sup>1</sup>, Tayani Moraes Machado (IC)<sup>1</sup> e Paulo César de Jesus (PQ)<sup>\*1,2</sup>.

<sup>1</sup>Departamento de Química - <sup>2</sup>PTB - Universidade Regional de Blumenau, Blumenau, SC, 89010-971  
vqm\_3@hotmail.com, tayani@al.furb.br, pcj@furb.br

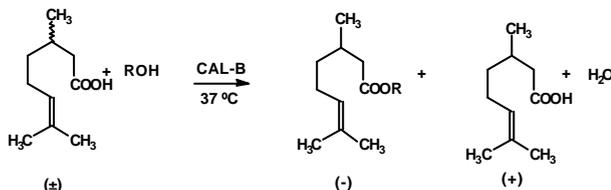
Palavras Chave: ácido citronílico, lipase, resolução.

### Introdução

O uso das enzimas, especialmente lipases, na síntese de moléculas quirais tem sido aceito como uma metodologia eficiente na preparação de compostos biologicamente ativos.<sup>1</sup> A otimização das condições de reação de um biocatalisador específico em meio orgânico tem sido foco de investigação uma vez que está sujeito a inativação por fatores associados ao meio reacional.<sup>2</sup> No presente trabalho, foi avaliado o efeito de solvente, razão molar e concentração de enzima na reação de esterificação do ácido racêmico ( $\pm$ )-citronílico com n-octanol catalisada pela lipase de *Candida antarctica* (CAL-B, 10 u/mg de sólido, Novozyme, Lot. LC 200217).

### Resultados e Discussão

Foi adicionado, em um erlenmeyer de 125 mL, 0,01 mol de ácido ( $\pm$ )-citronílico e 0,01 mol de n-octanol, 25 mL de diferentes solventes (hexano, heptano, ciclohexano e acetonitrila) e 100 mg de CAL-B. As reações foram realizadas em uma incubadora termostatizada (TE 420 da Tecnal) 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, e caracterizados por IV e RMN de <sup>1</sup>H. A CAL-B mostrou preferência pelo isômero com rotação óptica negativa, com excesso enantiomérico de 90% (**Equação 1**).



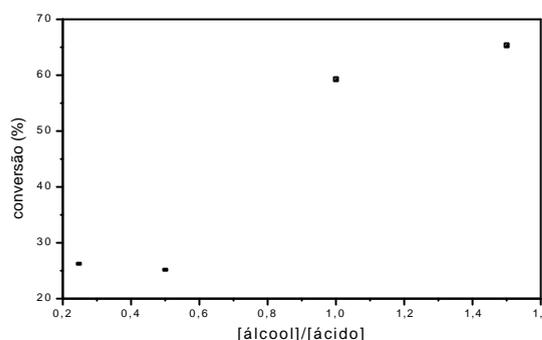
R = C<sub>n</sub>H<sub>2n+1</sub>  
onde n: 5,6,7,8,12

As porcentagens de conversão para a formação do (-)-citronelato de n-octila nos diferentes solventes podem ser observados na **Tabela 1**. Observa-se que solventes mais apolares favorecem a formação do éster. Foi realizado um estudo da razão molar para a formação do éster fixando a concentração molar do ácido em 0,02 mol e variando a do álcool (0,005, 0,01, 0,02 e 0,03 mols).

Os resultados podem ser observado na **Figura 1**.

**Tabela 1** – Porcentagens de conversão para a formação do (-)-citronelato de n-octila em diferentes solventes.

Solvente	log P	Conv. (%)
Acetonitrila	-0,33	24
Ciclohexano	3,2	40
Hexano	3,5	53
Heptano	4,0	50



**Figura 1** - Efeito da razão molar do álcool/ácido na preparação do (-)-citronelato de n-octila.

Na **Figura 1** podemos observar que um aumento na concentração do álcool favorece a formação do éster. Foi então avaliado o aumento na concentração da lipase para a reação de formação do (-)-citronelato de n-octila, utilizando 0,02 mols de substratos (1:1). Com 100 mg de enzima a conversão para éster foi de 59%, 200 mg foi de 61% e com 300 mg foi de 63%.

### Conclusões

Pelos resultados obtidos, pode-se concluir que para a preparação do (-)-citronelato de n-octila os melhores solventes foram os com log P > 3,0. O excesso de álcool favorece a conversão para éster enquanto que um aumento na quantidade de enzima afetou muito pouco o resultado.

### Agradecimentos

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

<sup>1</sup>Dalla-Vecchia, R.; Nascimento, M.G.; Soldi, V.; *Química Nova*, 27 (4), 623-630.

<sup>2</sup>Ashraf, G. *Tetrahedron*. 2007, 63 (8), 1721-1754.