

Síntese e desracemização do 1,2,4-butanotriol por biocatálise

Célio F. F. Angolini (IC)¹, Simone M. Mantovani (PG)¹, Luciana G. de Oliveira (PQ)¹, Anita J. Marsaioli (PQ)^{1*}. anita@iqm.unicamp.br

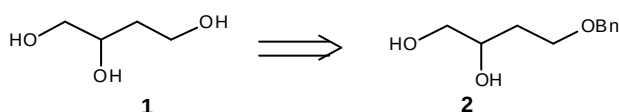
¹Universidade estadual de Campinas, Instituto de Química, C. P. 6754, CEP: 13083, Campinas - SP

Palavras Chave: 1,2,4-butanotriol, estereoinversão.

Introdução

Álcoois secundários quirais são intermediários sintéticos amplamente empregados em diversos setores como agroquímicos, indústrias farmacêuticas, alimentos e outros. Dentre as diversas maneiras de se obter álcoois enantiomericamente puros, a desracemização por estereoinversão é bastante interessante, já que fornece um único estereoisômero com 100 % de rendimento.

Dessa forma, conhecendo a capacidade de alguns microrganismos de realizar estereoinversão de álcoois secundários, utilizou-se o substrato o 1-(benziloxi)-3,4-diidroxibutano (**2**), derivado do 1,2,4-butanotriol (**1**), que é bloco quiral de diversas moléculas biologicamente ativas^{1,2}.

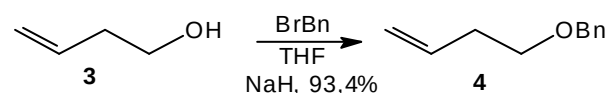


Esquema 1 – Substrato utilizado na tentativa de obtenção de **1** enantiomericamente puro.

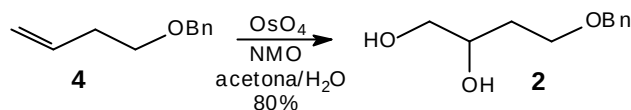
Resultados e Discussão

Com o intuito de preparar o substrato (**2**), a partir do 3-buten-1-ol (**3**) realizou-se a reação de proteção com brometo de benzila em THF obtendo o 1-(benziloxi)-3-buten-1-ol (**4**) num rendimento de 93,4%.

Esquema 2 – Preparação de **4**.

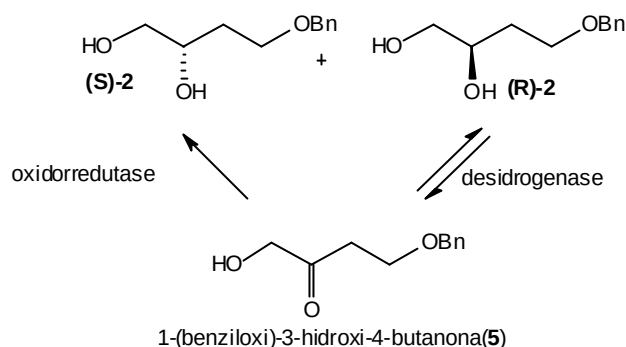


A partir deste realizou-se sua diidroxilação com o catalisador tetróxido de Ósmio na presença de N metilmorfolina-N-óxido (NMO) o que nos forneceu o 1-(benziloxi)-3,4-diidroxibutano (**2**) num rendimento de 80%.



Esquema 3 – Preparação do (±)-**2**

Em seguida realizou-se a reação entre esse



substrato e o melhor microorganismo para esta reação, cujo processo está sendo alvo de solicitação de patente.

Esquema 4 – Desracemização do (±)-**2**.

Os resultados revelaram que nessas condições o (S)-**2** foi obtido com ee de 50 %, indicando a possibilidade de estereoinversão do (R)-**2**.

Conclusões

Dessa maneira, a preparação do 1-(benziloxi)-3,4-diidroxibutano mostrou-se viável, pois forneceu o diol com rendimentos de 74,7 %. Além disso, o microorganismo em questão, foi capaz de desracemizar esse substrato fornecendo o (S)-**2** com 50% de ee.

Agradecimentos

PIBIC/CNPq, FAPESP, FINEP, PETROBRÁS

¹ Akiyama, K.; Yamamoto, S.; Fujimoto, H.; Ishibashi, M. *Tetrahedron*, **2005**, 61, 1827-1833.

² Dias, L. C.; Meira, P. R. R. *J. Org. Chem.*, **2005**, 70, 4762-4769.