

# Síntese via químio-enzimática de N-alquil-oxaziridina utilizando uréia-peróxido de hidrogênio na presença do líquido iônico [Bmim] PF<sub>6</sub>

Thiago Bergler Bitencourt\* (PG) e Maria da Graça Nascimento (PQ)

\*thiago06br@yahoo.com.br

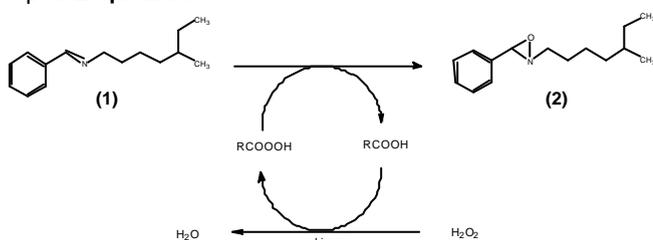
Departamento de Química – Curso de Pós-Graduação – Universidade Federal de Santa Catarina , Campus Trindade – Florianópolis – SC – Brasil – 88040-900.

Palavras Chave: lipase, uréia-peróxido de hidrogênio, oxaziridinas

## Introdução

As oxaziridinas constituem uma importante classe de compostos oxidantes e cada vez mais empregados em processos de síntese orgânica.<sup>1</sup> A utilização de uréia-peróxido de hidrogênio anidro (UPH) em reações de oxidação é de grande importância, pois além da mínima toxicidade, apresenta menos riscos na formação de produtos de hidrólise pela presença da água.<sup>2</sup>

Neste trabalho, foi realizada a preparação químio-enzimática de 1-fenil 3-metil-heptil oxaziridina (**2**) a partir de N-benziliden-3-metil-heptilamina (**1**). Nesta reação, o doador acila (ácido octanoico – 144mg - 1mmol) é convertido em peróxi-ácido pelas lipases Novozym 435, (CAL-B - 10000 u/g) e de Pseudomonas sp. (LPS – 30,000 u/g) na presença de UPH (37,6mg - 0,4mmol) e utilizado (*in situ*) na oxidação da ligação C=N de (**1**)(46,2mg - 0,2mmol) à temperatura ambiente e 200 rpm. **Esquema 1**



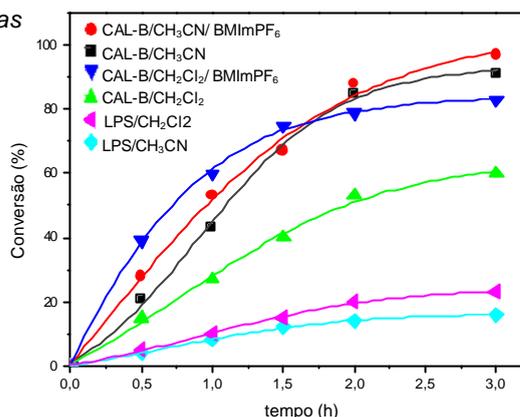
R = CH<sub>3</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-

**Esquema 1.** Formação da oxaziridina (**2**) via químio-enzimática.

## Resultados e Discussão

As conversões em oxaziridina (**2**) foram determinadas por cromatografia gasosa (CG - Shimadzu GC-14B) equipado com uma coluna capilar (Shimadzu SBP-5). As reações foram conduzidas em solventes orgânicos puros (acetonitrila e diclorometano) e em misturas com o líquido iônico (LI) hexafluorofosfato de 3butil-metilimidazólio, ([Bmim]PF<sub>6</sub>) 5:1 (v/v).

As conversões em oxaziridinas em função do tempo reacional, estão demonstradas na **Figura 1**. Nestas reações foram avaliados o efeito do solvente orgânico/adicação de LI e a procedência do biocatalisador.



**Figura 1.** Formação da oxaziridina (**2**) via químio-enzimática em função do solvente e tempo reacional. CG:  $t_i = 50^{\circ}\text{C}$ ;  $t_r = 5^{\circ}\text{C}/\text{min}$ ;  $t_f = 250^{\circ}\text{C}$ ;  $t_{\text{injetor}} = 280^{\circ}\text{C}$ ;  $t_{\text{detector(FID)}} = 290^{\circ}\text{C}$ .

Analisando os dados da **Figura 1**, observa-se que a CAL-B foi mais efetiva que a LPS na formação da oxaziridina (**2**), tanto na presença quanto na ausência de LI. Isto se deve à forma de emprego das lipases, visto que a CAL-B é imobilizada em resina aniônica, conferindo a esta maior estabilidade em solvente orgânico do que a LPS que é utilizada na forma nativa. Utilizando acetonitrila como solvente, as conversões com a LPS e CAL-B foram de 16% e 91%, e com diclorometano 23% e 60%, respectivamente em 3h.

Com a adição de LI pode-se observar, em geral, um aumento na formação de produtos de 91 para 97% utilizando acetonitrila e de 60% para 83% com diclorometano, ambos utilizando a CAL-B como biocatalisador.

## Conclusões

A oxaziridina (**2**) pode ser obtida via enzimática após 3 h de reação e a conversão foi dependente do solvente. A adição de LI pode ser uma alternativa eficaz para o aumento na conversão à produtos. A procedência da lipase e a forma de emprego (livre ou imobilizada), é outro fator determinante para a obtenção do produto desejado.

## Agradecimentos

UFSC, CNPq, CAPES, Amano e Novozymes.

<sup>1</sup> Kraiem, J.; Othman, R. B.; Hassine, B. B.; C. R. Chimie, 7 (10-11) 1119-1126, 2004.

<sup>2</sup> Ankudey, E. G.; Olivo, H. F.; Peeples, T.; *Green Chem.*; 2006, 8  
923-926, 2006.