

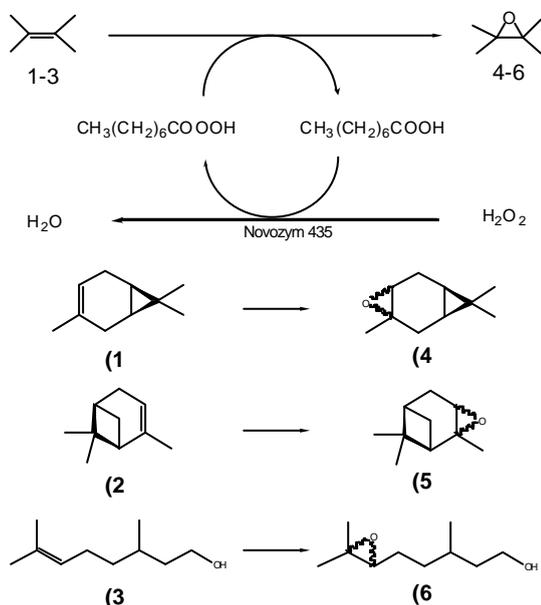
Epoxidação químico-enzimática de terpenos utilizando uréia-peróxido de hidrogênio mediada pela CAL-B.

Thiago Bergler Bitencourt (PG)*, Marcelo Alves Moreira (PG), Maria da Graça Nascimento (PQ)
*thiago06br@yahoo.com.br

Departamento de Química – Curso de Pós-Graduação – UFSC, Trindade – Florianópolis – SC – Brasil – 88040-900.
Palavras Chave: lipases, epoxidação, uréia-peróxido de hidrogênio

Introdução

A oxofuncionalização de olefinas é de grande interesse industrial devido à possibilidade de transformação fácil e rápida dos substratos em valiosos intermediários para síntese na química fina. A utilização de uréia-peróxido de hidrogênio anidro (UPH) em reações de oxidação é muito interessante, pois além da baixa toxicidade,¹ apresenta menos riscos na formação de produtos de hidrólise devido à ausência de água no meio reacional.² Neste trabalho, foi realizada a epoxidação químico-enzimática dos terpenos α -pineno (**1**), citrionelol (**2**) e (+)-3-careno (**3**), mediada pela lipase de *Candida antarctica* B, CAL-B(Novozym435-10.000u/g) com UPH como agente oxidante e CH₂Cl₂ como solvente externo. Alguns parâmetros experimentais foram avaliados, tais como a massa de UPH, a de doador acila (ácido octanóico) e a velocidade de agitação do meio. As conversões em epóxidos foram determinadas por cromatografia gasosa (Shimadzu 14B), após 3 horas de reação. **ESQ 1**



Esquema 1 – Reação de epoxidação químico-enzimática de terpenos.

Resultados e Discussão

As conversões percentuais em epóxidos (**4**)-(6), estão demonstradas na **Tabela 1**.

Tabela 1. Epoxidação químico-enzimática de terpenos.

Substrato	Conversão (%)		
	Cond. Padrão	Doador acila ^a	300rpm
1	90	77	84
2	>99	75	>99
3	90	71	>99

Condição padrão: 1-3(5mmol), UPH(5mmol), ác.oct.(10mmol), CAL-B(100mg), CH₂Cl₂(15mL), agitação 200rpm. (a)5mmol ác. oct.

Os resultados da **Tabela 1** demonstram que os epóxidos (**4**)-(6) foram obtidos com conversões de 90->99 nas condições padrão. Dobrando a quantidade de UPH (10mmol), as conversões em epóxidos foram quantitativas (>99%) com todos os substratos, provavelmente devido à maior concentração de H₂O₂ no meio reacional.

Quando a agitação foi de 300rpm, verificou-se uma pequena variação nas conversões; sendo que os epóxidos (**4**)-(6) foram obtidos com 84% e >99%. Diminuindo a quantidade de doador acila (5mmol), as conversões em epóxidos foram de 77, 75, 71% para os terpenos (**1**), (**2**) e (**3**), respectivamente. Diminuindo a quantidade de doador acila no meio, ocorreu uma diminuição na formação do peroxiácido e, conseqüentemente, na velocidade de epoxidação.

Este método demonstrou ser um procedimento eficiente e prático para epoxidação de terpenos, sendo realizado em condições brandas e com o uso de um oxidante (UPH) que é de fácil manuseio e ambientalmente seguro.

Conclusões

Os resultados obtidos demonstraram epóxidos derivados de terpenos podem ser obtidos *via* enzimática com a CAL-B e UPH em condições brandas. As conversões foram dependentes das quantidades de UPH e de doador acila, bem como da agitação do meio. Dependendo destas, os epóxidos foram obtidos com conversões >99%.

Agradecimentos

UFSC, CNPq, CAPES, Novozymes, e ao Prof. Dr. Ademir Farias Morel (UFSM-RS) pela doação do 3-careno.

¹ Ankudey, E. G.; Olivo, H. F.; Peebles, T.; Green Chem., 8, 923-926, 2006.

² Taliansky, S.; Synlett, 12, 1962-1963, 2005.