

Desracemização do α -tetralol via biocatálise extrativa com células íntegras

Bruna N. Rodrigues (IC), Dávila S. Zampieri (PG), Paulo José S. Moran (PQ), José Augusto R. Rodrigues* (PQ). *jaugusto@iqm.unicamp.br

Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Laboratório de Biocatálise, CP 6154, CEP 13083-970, Campinas, Brasil

Palavras Chave: Biocatálise, α -tetralol, desracemização, excesso enantiomérico, suporte, cofator.

Introdução

Este resumo apresenta o estudo da desracemização do α -tetralol utilizando células íntegras, testando diferentes parâmetros para a otimização do processo.

Resultados e Discussão

O composto estudado teve sua bioxidação mediada pelo *Saccharomices cerevisiae*, visando diferentes cetonas de sacrifício (para regeneração do cofator) e suportes para o analito, bem como a variação do tempo de pré-incubação do microorganismo e sua quantidade.

O esquema abaixo exemplifica os processos realizados e as tabelas 1-4 mostram os resultados obtidos para a resolução do α -tetralol.

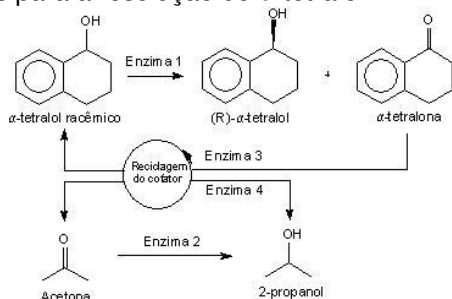


Figura 1. Visão geral do processo de desracemização do α -tetralol operado por levedura.

Tabela 1. Variação do tempo de pré-incubação do fermento.

Tempo de pré-incubação	ee (R)
sem pré-incubação	0,8%
1 dia	1,0%
2 dias	7,9%
3 dias	2,0%

Reação por 24 h à 180 rpm e 30°C com 2 g de ferm. para 10 mg de substrato, com Amb. como suporte e Ac como cetona de sacrifício.

Tabela 2. Variação da quantidade de fermento empregada para a reação.

Quantidade de fermento	0,2 g	0,5 g	1,0 g	2,0 g
ee (R)	(S) 37%	5,0%	1,6%	7,9%

Reação por 24 h à 180 rpm e 30°C com 2 dias de pré-inc e 10 mg de substrato, com Amb. como suporte e Ac como cetona de sacrifício.

Tabela 3. Testes para o suporte e para a cetona de sacrifício (sem cetona, com AcMe ou com Ac).

	Sem cetona	Com AcMe	Com Ac
Sem suporte			
ee (R)	6,9%	0,7%	7,8%
Com Amberlite (XAD-7)			
ee (R)	3,1%	0,6%	7,9%
Com papel de filtro			
ee (R)	1,4%	0,2%	1,4%

Reação por 24 h à 180 rpm e 30°C com 2 dias de pré-inc e 2 g de ferm para 10 mg de substrato.

Tabela 4. Variação do tempo de reação.

Tempo de reação	ee (R)
24 h	7,9%
36 h	7,7%
48 h	2,0%
60 h	1,6%
72 h	36%

Reação à 180 rpm e 30°C com 2 g de ferm. com 2 dias de pré-inc e 10 mg de substrato, com Amb. como suporte e Ac como cetona de sacrifício.

Símbolos utilizados: AcMe: Acetoacetato de metila; Ac: Acetona; ferm.: fermento liofilizado; Amb.: Amberlite (XAD-7); pré-inc: pré-incubação

Conclusões

Com os resultados obtidos, vê-se que as condições ideais para o processo estudado encontram-se nas reações utilizando-se Amberlite (XAD-7) como suporte e acetona como cetona de sacrifício com tempo de 2 dias de pré-incubação. Além disso, observou-se que maior tempo de reação resulta em maior ee, chegando a, aproximadamente, 36% com 72h de reação.

Sendo assim, essas condições podem ser o ponto de partida para o teste com outros alcoóis.

Agradecimentos

CNPq, SAE e Fapesp

Bisogno, F. R.; Lavandera, I; Kroutil, W.; Gotor, V. J. Org. Chem. 2009, 74,1730.